
**Methoden zur Reduzierung der
Gitteranisotropie bei der Simulation von
Erstarrungsvorgängen**

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)

vorgelegt dem Rat der Physikalisch-Astronomischen Fakultät der
Friedrich-Schiller-Universität Jena

von Dipl.-Phys. Klemens Reuther

geboren am 28.08.1983 in Dresden

Gutachter:

- 1. Prof. Dr. rer. nat. habil. Markus Rettenmayr (FSU Jena)**
- 2. Prof. Dr. rer. nat. habil. Klaus Kassner (OVGU Magdeburg)**
- 3. Prof. Dr.-Ing. habil. Heike Emmerich (U Bayreuth)**

Tag der Disputation: 29.08.2013

Kurzdarstellung

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Entwicklung von numerischen Methoden für die Simulation von Erstarrungsvorgängen. Bei der abbildenden Erstarrungssimulation existieren zwei große Problemfelder: Ein großer Bedarf an Rechenzeit sowie ein unerwünschter anisotroper Einfluss des Simulationsgitters.

Daher wurden ausgehend von diesen beiden Problemfeldern zwei verschiedene Ansätze gewählt: Einerseits wurde untersucht, inwieweit die bekannten, inhärenten Schwachstellen (insbesondere der anisotrope Einfluss des Simulationsgitters) der etablierten Zelluläre Automaten-Methode verbessert werden können, dass sie mit ihrer geringen Rechenzeit qualitativ und quantitativ auswertbare Ergebnisse produzieren kann. Dafür wurde eine Modifikation implementiert, die das verstärkte Wachstum der Grenzfläche in Gitterrichtung reduziert und gleichzeitig die physikalisch bevorzugte Wachstumsrichtung stärkt.

Zusammen mit der nach gründlicher Evaluation ausgewählten Höhenfunktionsmethode zur Krümmungsberechnung, welche in der Erstarrungssimulation bisher nicht eingesetzt wurde, wurde mit dieser Modifikation dendritisches Wachstum abseits der Gitterrichtung simuliert. Es gelang, den Gittereinfluss signifikant zu reduzieren und einen qualitativen Fortschritt gegenüber bisher veröffentlichten Simulationsergebnissen zu erzielen.

Der zweite Ansatz bestand in der Entwicklung einer tatsächlich anisotropiefreien Methode. Durch die Begründung auf einem zufälligen Punktgitter mit paarweisem Minimal-Punktabstand besitzt diese Methode keine bevorzugte Richtung. Durch eine systematische Untersuchung wurde eine modifizierte gitterlose Interpolations- und Integrationsmethode gefunden, die stabile Simulationen auf diesem Punktgitter erlaubt. Mit der Grenzflächenrepräsentation durch sich zwischen den Punkten bewegend Partikel wurden zunächst verschiedene Testprobleme aus dem Bereich der Erstarrung simuliert, und schließlich auch das Wachstum instabiler Grenzflächen erfolgreich berechnet.

Danksagung

Diese Arbeit hätte nicht ohne die vielfältige Unterstützung vieler Menschen entstehen können, denen ich auf diese Weise noch einmal meinen Dank aussprechen will. Ich danke Professor Markus Rettenmayr für die Betreuung dieser Arbeit, seine allzeit offenen Tür, Ohr und Geist, die ich oft für anregende und fruchtbare Gespräche und Diskussionen in Anspruch nehmen durfte. Des weiteren danke ich auch Professor Bozidar Sarler, ohne dessen hilfreiche und geduldige Einführung in die Welt der gitterlosen Methoden diese Arbeit nur zur Hälfte existieren würde. Für die herzliche Aufnahme sowie vielfache Anregung und Unterstützung danke ich der gesamten Gruppe “metallische Werkstoffe”, insbesondere aber Peter Galenko, Andreas Undisz, Andrea Löffler, Stephanie Fischer und Marcel Fink für vielfältige fachliche Diskussionen. Außerdem geht Dank natürlich an Sandra Langner, ohne die diese Arbeitsgruppe vermutlich viel weniger reibungslos funktionieren würde. Für ihre Hilfsbereitschaft in allen informatischen und softwaretechnischen Belangen danke ich Stefan Reuther und Andreas Schäfer. Ohne sie wären meine Simulationsprogramme doppelt so lang(sam). Für die Bereitstellung von Rechenressourcen danke ich Professor Dietmar Fey von der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg sowie dem URZ der Friedrich-Schiller-Universität Jena

Und zu guter Letzt danke ich natürlich Franziska, Helene und Anton, die die letzten Monate nur sehr wenig von mir hatten, sowie Dorothea, Johanna und Michi, die uns in dieser Zeit unterstützten.

Jena, im Mai 2013

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Grundlagen und Stand der Forschung	3
2.1. Zelluläre Automaten	3
2.1.1. Zelluläre Automaten für die Erstarrungssimulation	3
2.1.2. Einfluss des anisotropen Gitters	4
2.1.3. Berechnung der Diffusion und das unstetige Konzentrationsfeld an der Phasengrenzfläche	7
2.1.4. Entwicklung des Festphasenanteils	8
2.1.5. Wechsel der Phasenzugehörigkeit	10
2.1.6. Berechnung der Grenzflächegeometrie	12
2.1.7. Simulierte Dendriten aus der Literatur	15
2.1.8. Zusammenfassung	17
2.2. Gitterlose Methoden	18
2.2.1. Grundlagen: Gitterlose Interpolationsmethoden	18
2.2.2. Grundlagen: Integration der Wärmeleitungsgleichung	21
2.2.3. Gitterlose Methoden für nichtstationäre Diffusionsprobleme	23
2.2.4. Irreguläre Punktverteilungen für gitterlose Methoden	25
2.2.5. Gitterlose Methoden mit sich bewegende Grenzflächen	26
2.2.6. Zusammenfassung	28
2.3. Arbeitsansatz	29
3. Zelluläre Automaten	31
3.1. Mathematische Beschreibung solutaler Erstarrung	31

3.2.	Das zelluläre Automaten-Modell	32
3.2.1.	Gitter und Zustandsgrößen	32
3.2.2.	Physikalische und numerische Einheiten	32
3.2.3.	Diffusion und Massenbilanz	33
3.2.4.	Zustandsänderungen	35
3.2.5.	Grenzflächengeometrie: Krümmung und Normalenrichtung	36
3.3.	Modifikationen zur Kompensation der Gitteranisotropie	41
3.3.1.	Beeinflussung der Grenzflächenausrichtung - virtueller Festphasen- anteil	41
3.3.2.	Isotropie durch zeitlich gemittelte Anisotropie	42
3.4.	Simulation dendritischer Erstarrung	47
3.4.1.	Modellmaterial und -parameter	47
3.4.2.	Einfluss von Krümmungsberechnung und Anisotropiekorrektur	47
3.4.3.	Einfluss der Wachstumsrichtung	50
3.4.4.	Dendritensimulation mit Gitterrotation	51
3.4.5.	Quantitative Analyse: Wachstum in unterkühlter Schmelze	54
3.4.6.	Machbarkeitsuntersuchung: Simulation in 3D	56
3.5.	Diskussion	57
4.	“Meshless Front Tracking”	63
4.1.	Gitterlose Methoden für amorphe Punktemengen	63
4.1.1.	Isotropes Gitter	63
4.1.2.	Auswahl der gitterlosen Interpolationsmethode	65
4.2.	Repräsentation der Grenzfläche durch Partikel	69
4.2.1.	Nichtanwendbarkeit klassischer Partikel-Verfahren für gitterlose Me- thoden	69
4.2.2.	Grundlegendes Konzept für gitterlose Methoden	70
4.2.3.	Kopplung zwischen Grenzfläche und Konzentrationsfeld	71
4.2.4.	Bestimmung der Grenzflächengeometrie	72
4.2.5.	Grenzflächenbewegung	73
4.2.6.	Änderung der Phasenzugehörigkeit eines Gitterpunktes	74

4.2.7.	Dichtewichtung	74
4.2.8.	Fehlerminimierung durch deaktivierte Partikel	75
4.3.	Simulationsergebnisse	76
4.3.1.	Gitter- und Simulationsparameter	76
4.3.2.	Untersuchung des Konvergenzverhaltens: 2D-Diffusion	76
4.3.3.	Diffusion mit Grenzfläche: Gerichtete Erstarrung	78
4.3.4.	Stabile Grenzflächen in 2D: Erstarrung in einer quadratischen Form	81
4.3.5.	Instabile Grenzflächen - dendritische Erstarrung	82
4.4.	Diskussion	86
5.	Vergleich der Methoden	93
6.	Zusammenfassung	95
	Literaturverzeichnis	97
	Anhang	I
A.	Formelzeichen	I
B.	Mathematische Formeln & Grundlagen	V
B.1.	Für diese Arbeit relevante Methoden für reguläre, quadratische Gitter . . .	V
B.1.1.	Finite Differenzen	V
B.1.2.	Bilineare Interpolation in zwei Dimensionen	VI
B.1.3.	Krümmungsberechnung mittels des Level-Set-Ansatzes	VI
B.1.4.	Krümmungsberechnung mittels einer Höhenfunktion	VI
B.1.5.	Rotation eines Gitters um einen beliebigen Punkt	VII
B.2.	Kleinste-Quadrate-Anpassungen	VIII
B.2.1.	Klassische Kleinste-Quadrate-Anpassung	VIII
B.2.2.	Methode der kleinsten Abstandsqadrate	VIII
B.3.	Gitterlose Interpolationsmethoden	X
B.3.1.	Radiale Basisfunktionen (RBF)	X
B.3.2.	Gleitende kleinste-Quadrate-Anpassung (GWQ)	XI

B.3.3. Einfache kleinste-Quadrate-Anpassung - Diffuse Approximations- methode (DAM)	XIII
B.4. Explizite Zeit-Vorwärtsintegration der Diffusionsgleichung	XIII
B.4.1. Allgemeine Formulierung und Stabilitätskriterium	XIII
B.4.2. Formulierung für Finite Differenzen	XIV
B.4.3. Integrationsmethoden für gitterlose Methoden	XIV
B.5. Punktdichte und Minimalabstand	XVI
 Thesen	 XVII
 Ehrenwörtliche Erklärung	 XIX
 Lebenslauf und Wissenschaftlicher Werdegang	 XXI

1. Einleitung

Die Erstarrung von Metallen und Legierungen ist ein Prozess von enormer wirtschaftlicher Bedeutung. Dabei ist es insbesondere wichtig, die Parameter des erstarrten Gefüges einstellen zu können, da dieses wiederum eine breite Menge an Werkstoffparametern bestimmt. Im Zuge der Erstarrung interagieren jedoch verschiedene Material- und Prozessparametern, welche alle einen Einfluss auf das erstarrte Gefüge ausüben.

Den Erstarrungsprozess eines Werkstoffs vollständig, d.h. auf allen relevanten Längenskalen gleichzeitig, zu beschreiben ist (mit heutigen Mitteln) unmöglich. Stattdessen existieren eine Vielzahl an analytischen und numerischen Modellen, die jeweils Teilbereiche beschreiben. Dabei setzen makroskopische Modelle meist auf statistische Werkzeuge, um mikroskopische Vorgänge einzubeziehen, während mikroskopische Modelle im Allgemeinen lediglich einen kleinen zeitlichen und räumlichen Ausschnitt darstellen. Mit der steigenden Verfügbarkeit von Rechenleistung und Speicherplatz wachsen diese in numerischen Modellen repräsentierbaren Ausschnitte stetig, sodass sie heutzutage auch oft “mesoskopisch” genannt werden.

In diesen numerischen Modellen, die auf der Mikrometerskala aufbauen, ist die direkte Interaktion der Fest-Flüssig-Grenzfläche mit dem sie umgebenden Temperatur- und Konzentrationsfeld maßgeblich. Die diese Interaktion bestimmenden Gesetze sind seit der zweiten Hälfte des 20. Jahrhunderts weitgehend bekannt. Da die entstehenden Wachstumsstrukturen jedoch im Allgemeinen die Form von Dendriten besitzen und damit sehr komplex sind, existieren abbildende Modelle auf dieser Längenskala aufgrund der dafür benötigten Rechenleistung im Wesentlichen erst seit den 1990er Jahren.

Die derzeit in der Literatur dominierende Simulationsmethode ist dabei die Phasenfeldmethode in unterschiedlichen Variationen. Mit ihrer großen quantitativen und qualita-

tiven Genauigkeit aufgrund ihrer hochauflösenden Repräsentation der fest-flüssig-Grenzfläche stellt sie den “Standard” der Dendritensimulation dar. Dies wird allerdings gleichzeitig mit einem großen Bedarf an Rechenzeit erkaufte.

Bereits vor den Phasenfeldmodellen, die in der Mitte der 1990er Jahre aufkamen, wurden Zelluläre Automaten-Modelle in der Dendritensimulation eingesetzt. Diese besitzen eine wesentlich gröbere Repräsentation der Grenzfläche, wodurch ihr Rechenaufwand um ca. zwei Größenordnungen unterhalb dem der Phasenfeldmethode liegt. Gleichzeitig besitzt aufgrund dieser gröberen Grenzflächenrepräsentation das Simulationsgitter auch einen wesentlich größeren Einfluss auf das Ergebnis, welches durch den stark anisotropen Einfluss des Gitters verfälscht wird.

Die vorliegende Arbeit soll nun zum einen ergründen, ob die Qualität der zelluläre Automaten-Methode durch Modifikationen mit sinnvollem Aufwand soweit gesteigert werden kann, dass sie durch ihren Rechenzeitvorteil wieder gegenüber der Phasenfeldmethode konkurrenzfähig wird. Da das Anisotropieproblem auch die Phasenfeldmethode, wenn auch in geringerem Maße, beeinflusst, soll auch für dieses in dieser Arbeit ein Lösungsansatz entwickelt werden. Dazu wird versucht, durch ein auf einem grundlegend neuen, anisotropiefreien Gitter beruhendes Simulationskonzept eine Simulationemethode zu entwickeln, dessen Ergebnisse keine richtungsabhängigen Einflüsse durch die Methode aufweisen.

2. Grundlagen und Stand der Forschung

2.1. Zelluläre Automaten

2.1.1. Zelluläre Automaten für die Erstarrungssimulation

Die ersten Anfänge zur Erstarrungssimulation mittels Zellulärer Automaten reichen in die 1980er Jahre zu den Arbeiten von Smith [1] und Umantsev [2] zurück. Diese Autoren simulierten zunächst die Erstarrung reiner Stoffe.

Während diese Modelle im Wesentlichen Ergebnisse qualitativer Art lieferten, folgten dann in der ersten Hälfte der 1990er Jahre weitere Modelle mit unterschiedlich detailliertem physikalischen Hintergrund. Ihre Hochzeit erlebten die Zelluläre-Automaten-Modelle schließlich gegen Ende des 20. Jahrhunderts. Seitdem ist ihre Bedeutung mit der zunehmenden Popularität der konkurrierenden Phasenfeldmethode in Verbindung mit den rapide und stetig sinkenden Kosten für Rechenzeit wieder zurückgegangen.

Der bei Weitem überwiegende Teil der dokumentierten Zelluläre-Automaten-Modelle für Erstarrung zeichnet sich durch folgende gemeinsame Eigenschaften aus, wobei es in allen Punkten auch abweichende Ansätze gibt:

- Begründung auf einem regulären, kartesischen Gitter,
- Definition des Zustandes einer Zelle durch drei Größen: lokale Konzentration der gelösten Komponente, Phasenzugehörigkeit sowie Festphasenanteil.
- Integration der Diffusionsgleichung durch Finite Differenzen und ex-

plizite Zeit-Vorwärts-Integration,

- Drei Zustände der Phasenzugehörigkeit: Festkörper, Flüssigkeit und Grenzfläche. Lediglich Grenzflächenzellen können ihren Festphasenanteil verändern. Feste Zellen haben einen Festphasenanteil von eins, flüssige Zellen einen von null,
- Bereiche fester Zellen sind von Bereichen flüssiger Zellen durch eine einzelne Schicht Grenzflächenzellen getrennt.

Um aus diesen Grundbestandteilen ein physikalisches Modell solutaler, dendritischer Erstarrung zu formulieren, sind folgende Teilprobleme zu lösen:

1. Berechnung der Diffusion in der Nähe der Phasengrenzfläche unter Berücksichtigung der Unstetigkeit des Konzentrationsverlaufs über die Grenzfläche,
2. Veränderung des Festphasenanteils anhand des Konzentrationsfeldes um die Grenzfläche herum,
3. Wechsel der Phasenzugehörigkeit einer Zelle nach fixen Kriterien,
4. Berechnung der Grenzflächengeometrie (Normalenrichtung, Krümmung)

Ein weiteres Problem, welches jedoch algorithmisch schwer zu fassen ist, ist die Minimierung des Einflusses der Anisotropie des regulären Gitters auf das Simulationsergebnis. Durch die regelmäßige Natur des Gitters übt dieses einen anisotropen Einfluss bei allen vier Teilbereichen aus.

2.1.2. Einfluss des anisotropen Gitters

Der simulierte erstarrende Dendrit, repräsentiert durch die Menge an festen und Grenzflächenzellen, wächst notwendigerweise in Schritten von ganzen Zellen. Daher ist dessen Grenzfläche in Längenskalen der Zellengrößen notwendigerweise gestuft. Diese diskrete Darstellung übt einen direkten Einfluss auf die Geometrie der erstarrenden Form aus. Dies wurde ausführlich in [3] anhand eines einfachen, binären Ausbreitungsmodells untersucht. Bei diesem erhielt eine Zelle den Zustand eins, wenn in ihrer Nachbarschaft mindestens eine bestimmte Anzahl Zellen ebenfalls den Zustand eins besitzt. Dies entspricht dem realen Fall der kreisförmigen Ausbreitung einer Front mit konstanter Geschwindigkeit.

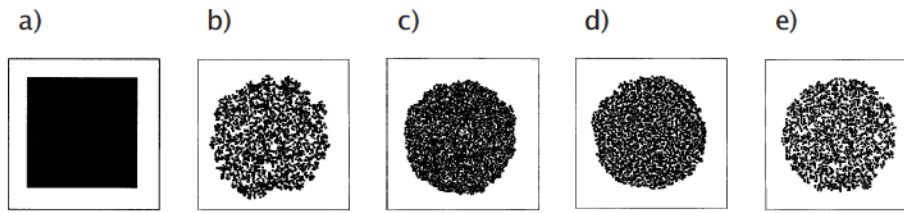


Abbildung 2.1.: Ergebnis einer einfachen Wachstumssimulation auf unterschiedlichen Gittern (aus [3]): a) kartesisches Gitter; b) zufällige Punktverteilung; c) zufällige Verteilung mit Mindestabstand; d) verschobenes kartesisches Gitter; e) teilweise aktives kartesisches Gitter.

Regelmäßige kartesische, hexagonale oder nicht-periodische Gitter ergaben facettierte Ergebnisse, ebenso kartesische Gitter mit größeren Nachbarschaften und eventuellen Abstandswichtungen. Entsprechend wurde auch eine Abhängigkeit der mittleren Geschwindigkeit der Grenzfläche von ihrer Orientierung gefunden.

Bei zufälliger Platzierung der zellulären Automaten konnte hingegen eine isotrope Wachstumsgeschwindigkeit festgestellt werden, ebenso näherte sich die Form einem Kreis an. Bei zufälliger Platzierung mit der zusätzlichen Bedingung eines minimalen paarweisen Abstandes wurde diese Annäherung noch besser. Bei verschobenen Gittern [4], bei denen jede Zelle eines kartesischen Gitters um einen kleinen Betrag verschoben wurde, sowie bei teilweise aktiven Gittern, bei denen nach zufälliger Auswahl nur jede zweite Zelle an der Simulation teilnahm, wurden vergleichbare Ergebnisse gefunden (Siehe Abbildung 2.1).

Bei all diesen nicht-regelmäßigen Gittern wurde als Nachbarschaft ein konstanter Kreisradius so gewählt, dass die mittlere Anzahl Nachbarn ungefähr neun betrug. Dabei traten jedoch signifikante Schwankungen in der Zahl der Nachbarn auf. Diese waren bei den komplett zufälligen und den teilweise aktiven Gittern am größten, während sie bei den verschobenen Gittern am geringsten waren.

Untersuchte stochastische Methoden (Zufallswechsel mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit, sequentielle Auswertung der Zellzustände in zufälliger Reihenfolge mit und ohne Vermeidung von Wiederholungen) führten zu schlechteren Ergebnissen mit anisotroper Geschwindigkeit oder irregulären Strukturen.

Ein Versuch, diese Erkenntnisse in ein Erstarrungsmodell mit zellulären Automaten einzuführen, sind die sogenannten Punktautomaten [5]. Das publizierte Modell verwendet

ein verschobenes Gitter, um thermische Erstarrung zu simulieren. Leider beruht es auf unphysikalischen Annahmen (siehe Abschnitt 2.1.4), was die Interpretation der Ergebnisse auch hinsichtlich des Einflusses des gewählten Gitters verhindert.

Die meisten veröffentlichten zelluläre Automaten-Erstarrungsmodelle benutzen jedoch kartesische Gitter, da dies neben der zugrundeliegenden Berechnung der Diffusion auch die Programmstruktur stark vereinfacht. Stattdessen wurden für die einzelnen Teilalgorithmen der Zelluläre Automaten-Modelle unterschiedlichste Ansätze untersucht, deren Hauptaufgaben die Verringerung der durch das einfache Gitter erzeugten Anisotropie ist.

In einzelnen Veröffentlichungen wurden verschiedene Korrekturalgorithmen vorgeschlagen: In [6] wurde abhängig von der lokalen Krümmung die Veränderung des Festphasenanteils beschränkt, um scharfe Spitzen und Gräben zu vermeiden. Ein ähnlicher Ansatz für drei Dimensionen wurde in [7] vorgestellt: Dabei wurde für das Umwandeln einer Flüssigzelle in eine Grenzflächenzelle ein Minimum für den mittleren Festphasenanteil seiner Nachbarn festgelegt. Dabei hing die Form des entstehenden Dendriten sehr stark von diesem Parameter ab. In [8] wurden die Flüssigzellen in Moore-Umgebung um die Grenzflächenzellen herum insofern als Teil der Grenzfläche angesehen, als dass diese die Grenzflächenkonzentration besitzen. Flüssigzellen, die lediglich übernächster (also diagonal) Nachbar einer Grenzflächenzelle waren, wurden schwächer von dieser beeinflusst als Nächste-Nachbar-Flüssigzellen.

Eine zusätzliche Variante, die unerwünschte Gitteranisotropie zu verringern besteht darin, das Gitter während der Simulation wiederholt zu rotieren, sodass die Gitteranisotropie im Laufe des Simulationslaufs in unterschiedliche Richtungen wirkt. Wenn die Zeitskala für die Gitterrotation viel kleiner als die Zeitskala der gesamten Simulationsrechnung ist, so wird erwartet, dass sich die künstliche Anisotropie herausmittelt. Diese Technik wurde in [9] vorgeschlagen und erfolgreich auf ein Phasenfeldmodell angewandt.

2.1.3. Berechnung der Diffusion und das unstetige Konzentrationsfeld an der Phasengrenzfläche

Neben einem Modell thermischer Erstarrung formulierte Dilthey [10] auch erstmals ein Modell für solutale Erstarrung einer binären Legierung. Im Gegensatz zur thermischen Erstarrung eines reinen Stoffes, welche mit den bis dahin veröffentlichten Modellen ausschließlich behandelt wurde, tritt bei der solutalen Erstarrung nicht nur eine Unstetigkeitsstelle in der ersten Ableitung des Temperaturfeldes auf, sondern auch eine Unstetigkeit im Konzentrationsfeld selbst. Dies verhindert eine direkte Anwendung der bis dahin etablierten Modelle. Dilthey behandelte in seiner Arbeit die Sprungstelle des Konzentrationsfeldes an der Phasengrenzfläche durch Annahme eines konstanten Verteilungskoeffizienten $k = C_s^*/C_l^*$. Damit konnte er in der Festphase die physikalische Konzentration durch den Verteilungskoeffizienten dividieren und erhielt somit ein überall stetiges Konzentrationsfeld. Das Problem des Sprungs im Diffusionskoeffizienten löste er, indem er im Bereich der Phasengrenzfläche mit f_s -gewichteten, gemittelten Diffusionskoeffizienten arbeitete. Damit war die Lösung der Diffusionsgleichung in der gesamten Domäne möglich.

Nastac [11] berechnete die Diffusion mit f_s -gewichteten Konzentrationen an der Grenzfläche. Dies führt jedoch dazu, dass die Konzentrationen an der Grenzfläche systematisch unterschätzt werden und stellt daher keine physikalisch sinnvolle Repräsentation dar. Dennoch wurde diese Methode von weiteren Publikationen aufgegriffen [12, 13].

Beltran-Sanchez et al. [6] benutzten als erste eine explizite Zwei-Domänen-Variante: In den festen und flüssigen Domänen wird die Diffusionsgleichung klassisch durch explizite Finite Differenzen gelöst, und dabei gegebenenfalls die Konzentrationen der Grenzfläche benutzt. In Grenzflächenzellen wird hingegen der Konzentrationsfluss für jeden Nachbarn mit dem jeweiligen Diffusionskoeffizienten, je nach dessen Zustand, einzeln berechnet. Dieser Ansatz hat den Vorteil, im Prinzip auch ohne den Verteilungskoeffizienten auszukommen und damit auch Simulationen mit realen Phasendiagrammen zu erlauben. Zhu et al. [14] formulierten diesen Ansatz als Ein-Domänen-Lösung.

2.1.4. Entwicklung des Festphasenanteils

Für die Veränderung des Festphasenanteils anhand des die Grenzfläche umgebenden Konzentrationsfeldes existieren in der Literatur, neben einzelnen, eher exotisch zu nennenden Varianten, im Wesentlichen zwei Methoden: Die explizite Berechnung einer Grenzflächengeschwindigkeit und Bewegung einer virtuellen Grenzfläche, oder eine zellbezogene Massenbilanz.

Variante I: Geschwindigkeit einer Grenzfläche in der Zelle

Aus der Massenbilanz (3.2) kann aus dem die Phasengrenzfläche umgebenden Konzentrationsfeld die Geschwindigkeit der Grenzfläche

errechnet werden. Diese Geschwindigkeit muss geometrisch interpretiert werden, um eine Aussage über die Veränderung des Festphasenanteils treffen zu können.

Sasikumar et al. [15] teilten in ihrem Modell zur thermischen dendritischen Erstarrung die Grenzfläche in einer Zelle in einen horizontalen und einen vertikalen Part auf (Abbildung 2.2a). Der horizontale Part der Grenzfläche bewegte sich dann anhand der eindimensionalen Massenbilanz in vertikaler Richtung und umgekehrt. Als Festphasenanteil wird die Fläche hinter diesen zwei Grenzflächen angenommen. Aufgrund seiner Einfachheit wurde dieser Ansatz vielfach aufgegriffen [6, 10, 11, 16–18]. Diese Zweigrenzflächeninterpretation hat jedoch die Eigenschaft, dass für die Berechnung der Zunahme des Festphasenanteils im Prinzip die Summe der Komponenten des Konzentrationsgradienten verwendet wird, und nicht dessen Betrag. Dadurch wird das Festphasenwachstum insbesondere in solchen Grenzflächenzellen, die in zwei Richtungen flüssige Zellen zum Nachbarn haben, überschätzt.

Eine alternative Variante ist das Wachsen einer bestimmten geometrischen Formfunktio-

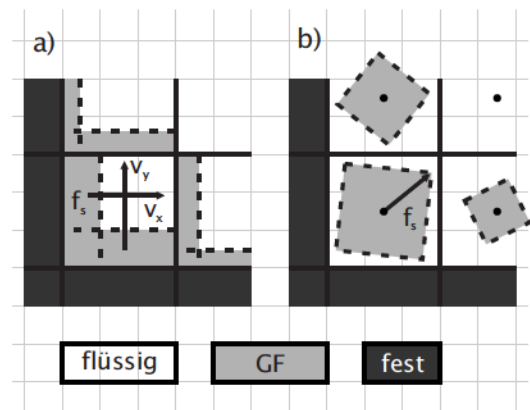


Abbildung 2.2.: Gebräuchliche geometrische Interpretationen des Festphasenanteils f_s : a) Fläche, die durch eine horizontale und eine vertikale Grenzfläche begrenzt wird, die sich mit unabhängiger Geschwindigkeit bewegen; b) Wachstum einer Formfunktion. Zuordnung der Zellzustände: *weiß*: flüssig; *hellgrau*: Grenzfläche; *dunkelgrau*: fest.

on mit der berechneten Geschwindigkeit (Abbildung 2.2b). Dieser Ansatz stammt aus dem Zelluläre Automaten-Finite Elemente (“CAFE”) Modell von Rappaz und Gandin [19, 20]. Dieses Modell dient zur Simulation erstarrenden Gefüges, indem wachsende Dendriten durch eine umhüllende Form dargestellt werden. Diese Form wächst mit der Geschwindigkeit, mit der sich die Dendritenspitzen bewegen. Deren Geschwindigkeit kann durch analytische Modelle (insbesondere das LGK-Modell von Lipton, Glicksman und Kurz [21]) anhand der Unterkühlung an der Dendritenspitze beschrieben werden.

Diese geometrische Interpretation mit wachsender Umhüllenden wurde mit unterschiedlichen geometrischen Formen auch für die orts aufgelöste Simulation dendritischen Erstarrens verwendet. Benutzte Formen (in 2D) waren dabei sowohl die ursprünglich benutzten Quadrate [22] als auch andere, “dendritische” Formen [5, 23]. Allen diesen Modellen ist allerdings gemein, dass sie auch zur Berechnung der Wachstumsgeschwindigkeit der lokalen fest-flüssig-Grenzfläche das KGT-Modell heranziehen. Während dieses im Fall des mesoskopischen CAFE-Modells anwendbar ist, ist es hingegen zur lokalen Beschreibung beliebiger Stellen des Dendriten physikalisch nicht sinnvoll, was erhebliche Zweifel an der Interpretierbarkeit der Ergebnisse dieser Arbeiten aufwirft.

Variante II: Massenbilanz

Beim Massenbilanz-Ansatz wird die differentielle Massenbilanz der Grenzfläche nicht angewendet. Stattdessen wird die Konzentration der Grenzflächenzellen zunächst anhand der Volumendiffusion verändert. Die Differenz zwischen den Grenzflächenkonzentrationen $C_{l,s}$ nach Diffusion und den Gleichgewichtskonzentrationen $C_{l,s}^*$ der Grenzfläche wird durch Veränderung des Festphasenanteils ausgeglichen [8, 14, 24, 25].

Dieser Ansatz entspricht einer Volume-of-Fluid-Methode, indem eine Grenzflächenzelle aus teilweise Flüssigkeit und teilweise Festphase besteht, welche in sich jeweils eine konstante Konzentration, nämlich die Gleichgewichtskonzentration, haben. Über die räumliche Verteilung dieser Phasen innerhalb der Zelle wird hingegen keine Aussage gemacht.

Im Gegensatz zur ersten Variante besitzt der Massenbilanzansatz den Vorteil, exakte Massenerhaltung zu erlauben. Gleichzeitig wird allerdings die Diffusion in der Nähe einer Spitze überschätzt, da die Grenzfläche mit Schmelze in allen umgebenden Flüssig-Zellen

interagiert und nicht nur mit den direkt vor ihr liegenden.

2.1.5. Wechsel der Phasenzugehörigkeit

Ein weiterer wichtiger Aspekt ist das Kriterium zur Veränderung der Phasenzugehörigkeit. Dieses Kriterium definiert, wann die Grenzfläche eine Zelle komplett durchquert hat und diese fest wird, bzw. wann die Grenzfläche in eine neue Zelle eintritt und diese sich als Grenzflächenzelle verhält. In dem überwiegenden Teil der Modelle wird diese Problematik so gelöst, dass eine Zelle fest wird, wenn ihr Festphasenanteil Eins erreicht, und alle flüssigen Zellen in ihrer von-Neumann-Umgebung zu Grenzflächenzellen werden [11, 16–18, 24, 25]. Damit wird gleichzeitig die Annahme getroffen, dass eine Zelle nur dann zur Grenzfläche gehören

kann, wenn sie eine feste Zelle in ihrer von-Neumann-Nachbarschaft besitzt. Es existieren daneben auch zahlreiche Modifikationen dieser Variante: Phasenübergang bei $f_s \geq 1$ nur mit einer gewissen, von der kristallographischen Orientierung des Keims oder des Festphasenanteils der Zelle abhängigen Wahrscheinlichkeit [11, 15] in jedem Zeitschritt; Umwandlung von flüssigen in Grenzflächenzellen in der Moore- statt der von-Neumann-Umgebung, wenn die Vorzugsorientierung des Dendriten 45° zur Gitterrichtung beträgt [16, 17]; Forderung einer gewissen zusätzlichen Mindestmenge an Festphase in der Moore-Umgebung [7].

Die Grenzflächenrepräsentation in von-Neumann-Umgebung besitzt die Eigenheit, dass es nicht möglich ist, beliebige Grenzflächenverläufe so abzubilden, dass der Flächenanteil jeder Zelle, welcher sich hinter der Grenzfläche befindet, identisch mit dem Festphasenanteil ist (Abbildung 2.3a). Sie hat hingegen den Vorteil, dass die Diffusionsberechnung in den Grenzflächenzellen genauso wie in der Fest- und Flüssigphase mit der selben Finite-Differenzen-Methode, welche ja ebenfalls auf der von-Neumann-Nachbarschaft operiert,

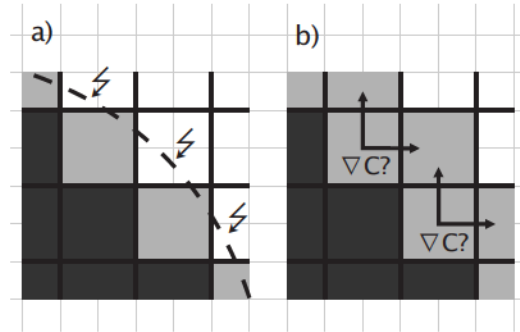


Abbildung 2.3.: Nachteile unterschiedlicher Konventionen für Grenzflächenzellen: a) Grenzflächenzellen nur in von-Neumann-Nachbarschaft zu festen Zellen ermöglichen keine realistische Darstellung eines Grenzflächenverlaufes (*Pfeile* bezeichnen Zellen mit widersprüchlichem Zustand); b) Grenzflächenzellen in Moore-Umgebung um feste Zellen benötigen komplexere Diffusionsalgorithmen als Finite Differenzen.

durchgeführt werden kann. Methoden, welche die Moore-Nachbarschaft für neue Grenzflächenzellen einsetzen, benötigen hingegen einen anderen Diffusionsalgorithmus an der Grenzfläche (siehe Abbildung 2.3b). Sie benötigen entweder Finite Differenzen höherer Ordnung [16, 17] oder eine ausgedehnte Form der Grenzfläche [8], welche jedoch mit einer Verringerung der Ortsauflösung einhergeht.

Eine besondere Methode wird in der Arbeit von Beltran-Sanchez et al. [6] in Form einer an Front Tracking angelehnten Methode vorgestellt: Aus dem Feld der Festphasenanteile wird in jedem Schritt eine durch Partikel repräsentierte Grenzfläche konstruiert. Diese Partikel bewegen sich vom Zentrum der Zelle weg in Richtung ihrer Normalenrichtung, der Festphasenanteil ist dann das Maß für die Position auf ihrem Bewegungspfad. Diese Partikel werden verbunden und auf diese Weise eine “Grenzfläche” konstruiert. Befinden sich die Zentren flüssiger Zelle innerhalb dieser Grenzfläche, so werden sie zu Grenzflächenzellen. Details, wie die Berechnung der Konnektivität der Partikel oder das Kriterium, wann eine Grenzflächenzelle fest wird (es können Festphasenanteile größer eins erreicht werden, ohne dass eine neue Zelle zur Grenzfläche wird), werden in der Arbeit jedoch nicht erläutert. In seiner geometrischen Wirkung entspricht diese Methode einer Phasenänderung in Moore-Umgebung, allerdings mit einer komplexen, unter anderem von der lokalen Grenzflächennormalen abhängigen Geschwindigkeitsskalierung. Auch dieser Ansatz wurde durch andere Gruppen aufgegriffen [23, 26].

Eine Mischmethode ist in [14] zu finden. Obwohl das Wachstum im Sinne einer Massenbilanz berechnet wird, also keine geometrischen Annahmen über die Verteilung der beiden Phasen in der Zelle gemacht werden, so wird für den Phasenwechsel trotzdem die Partikelmethode aus [6] angewandt, welche Annahmen über die Grenzflächenposition beinhaltet. Des Weiteren wird der Festphasenanteil auf Eins begrenzt, sodass das Phasenwechselverhalten außer in Extremfällen im Wesentlichen einem von-Neumann-Wachstum entspricht. Dazu passt, dass in diesem Modell die Diffusion in der gesamten Domäne durch einfache zentrierte Finite Differenzen berechnet wird, was in den seltenen Fällen, dass eine Grenzflächenzelle außerhalb der von-Neumann-Umgebung einer festen Zelle entsteht, zu Problemen führen würde, da diese Grenzflächenzelle nicht über Diffusion an den Festkörper gekoppelt ist, während gleichzeitig die Diffusion in die flüssige Phase hinein

überschätzt wird.

Bis auf wenige Ausnahmen [10, 27] wurde in den veröffentlichten Modellen der Vorgang des Schmelzens, also das eine Grenzflächenzelle flüssig und eine feste Zelle Grenzflächenzelle wird, nicht behandelt. In [10], einem Modell thermischer Erstarrung, findet der Übergang zwischen festen und flüssigen Bereichen über mehrere Zellen hinweg statt: Insbesondere wird für jede Zelle, auch flüssige und feste, in jedem Zeitschritt geprüft, ob sich ihr Festphasenanteil verändert, sodass keine gesonderte Behandlung vonnöten ist. Die genaue Vorgehensweise in [27] ist der veröffentlichten Arbeit leider nicht zu entnehmen.

2.1.6. Berechnung der Grenzflächengeometrie

Das erste Zelluläre Automaten-Modell für solutale Erstarrung [10] war gleichzeitig auch das erste, welches die Anisotropie der Grenzflächenenergie berücksichtigte. Die dafür benötigte lokale Grenzflächennormale wurde dabei ermittelt, indem in einer definierten Umgebung die Massenschwerpunkte des Fest- und des Flüssigphasenanteils berechnet und die Verbindungslinie dieser beiden Punkte als Normalenrichtung angenommen wurde. Auch in späteren Modellen [5, 8] wurde dieser Ansatz aufgegriffen. In einzelnen Modellen [11] wurde die Annahme der Massenbilanz, dass der für das Wachstum der Grenzfläche maßgebende Atomfluss derjenige senkrecht zur Grenzfläche ist, umgekehrt: Als Normalenrichtung wurde die Richtung des maximalen Flusses $-\nabla C$ an der Grenzfläche angenommen.

Der bei weitem überwiegende Teil aller veröffentlichten Modelle verwendet jedoch einen Ansatz aus der Niveaumengen (“Level Set”)-Methodologie (entwickelt in [28], oft zitiert als Teil des Programmpaketes “RIPPLE” [29]):

$$\vec{n} = -\vec{\nabla} f_s \quad (2.1)$$

Dem liegt der Gedanke zugrunde, dass das Feld der Festphasenanteile, welches in flüssigen Zellen den Wert Null und in festen Zellen den Wert Eins besitzt, als eine Niveaumenge angesehen werden kann, welche auf seiner Höhenlinie von 0,5 die Grenzfläche repräsentiert. Es ist dabei aber anzumerken, dass das Festphasenfeld auf einer mit der Zellgröße vergleichbaren Längenskala von Null auf Eins wechselt, was einer sehr groben Auflösung

der Niveaumenge entspricht. Bei der Ableitung solch eines grob aufgelösten Feldes kann mit großen Fehlern gerechnet werden. Dabei ist bei Modellen, die Grenzflächenzellen in der Moore-Umgebung von festen Zellen erlauben, diese Längenskala etwas größer als bei solchen, die Grenzflächenzellen nur in der von-Neumann-Umgebung erlauben, was ein geringeres Fehlerniveau bei Ersteren erwarten lässt.

Bei der Berechnung der Krümmung kann mit einem noch größeren Einfluss dieses Fehlers gerechnet werden, da diese als Differentialoperator zweiter Ordnung noch empfindlicher auf die grobe Auflösung des Festphasenanteilsfeldes reagiert. Bei Grenzflächenrepräsentationen mit Grenzflächen lediglich in von-Neumann-Nachbarschaft zu festen Zellen kann dabei davon ausgegangen werden, dass die Krümmungsberechnung sehr stark von der Lage der Grenzflächenzellen zueinander abhängig ist: So hängt zum Beispiel bei einer Eckzelle mit je zwei flüssigen und festen Nachbarn die berechnete Krümmung einzig und allein von ihrem eigenen Festphasenanteil ab, während bei einer Zelle an einer planen Grenzfläche, die entlang einer Gitterachse liegt, auch ihre zwei benachbarten Grenzflächenzellen in die Berechnung eingehen. Wenn Grenzflächenzellen in Moore-Umgebung von festen Zellen erlaubt sind, ist auch dieser Effekt abgeschwächt, aber letztendlich kann davon ausgegangen werden, dass die Gitteranisotropie auch einen Effekt auf die Berechnung der Krümmung besitzt und auch auf diesem Weg die Simulation nachteilig beeinflusst.

Alle diese Effekte wurden in der vorliegenden Literatur jedoch nicht diskutiert, obwohl die Effekte der Krümmung entscheidend für die Entstehung anisotroper dendritischer Strukturen sind. Stattdessen wurden verschiedenste Verfahren zur Krümmungsberechnung in veröffentlichten Modellen implementiert, wobei eine systematische Evaluation im Rahmen der Zelluläre Automaten-Modelle ausblieb.

In den frühen Zelluläre Automaten-Modellen wurden zunächst Zellzählungsmethoden benutzt. Dabei wird die Summe der Festphasenanteile in einer gewissen Umgebung um die interessierende Zelle als ein Maß für die Krümmung angenommen. Diese Methode wurde zuerst in der Fluidodynamik angewandt [30], mathematisch untersucht in [31] und weiter entwickelt in [32]. In Zelluläre Automaten-Modellen dendritischen Wachstums wurde es zuerst in [33] mit Zählung in der von-Neumann-Umgebung angewandt, später in größeren

Umgebungen in [15] sowie von dort modifiziert in [10]. Ausgehend von den letzten beiden Arbeiten wurde die Methode in vielen Modellen eingesetzt. In [34] wurde sie noch zusätzlich modifiziert, um die Kristallanisotropie schon in der Krümmungsberechnung einzubeziehen. Trotz hoher Beliebtheit aufgrund ihrer Einfachheit leidet diese Methode allerdings unter ihrer lediglich qualitativen Natur. Innerhalb der gewählten Umgebung gibt sie zwar ein Maß für die mittlere Krümmung an, da die Umgebung aber relativ groß gewählt werden sollte (Radius in der Größenordnung 10 Zellen), ist die Information lokal für die gewählte Zelle inexakt.

Das erste publizierte Zelluläre Automaten-Modell dendritischer Erstarrung [1] benutzte ein Grenzflächenrekonstruktionsverfahren wie in der Fluidodynamik gebräuchlich (z.B. [30, 35]). Bei diesen Verfahren wird der Verlauf der Grenzfläche innerhalb der Zelle durch eine vorgegebene Funktion (z.B. linear, Parabel) angenähert und die Krümmung anhand dieser Grenzflächenstücke berechnet. In der Erstarrungssimulation mittels Zellulärer Automaten wurden solche Methoden beispielsweise in [36] und [37] angewandt. Die in diesen Arbeiten verwendete PLIC (Piecewise Linear Interface Calculation, ein einfacherer Vertreter der Rekonstruktionsmethoden) weist jedoch nur eine geringe Genauigkeit auf, während die in der Fluidodynamik als recht genaue Methode etablierte CLSVOF (Combined Level Set-Volume of Fluid, zuerst in [38] eingeführt) einen erheblichen Rechenaufwand erfordert und bisher nicht in der Dendritensimulation in Erscheinung getreten ist.

In den letzten Jahren hat sich jedoch in der Zelluläre Automaten-Dendritensimulation trotz der oben aufgeführten erwartbaren großen systematischen Fehler die Level-Set-Methode durchgesetzt. Dabei wird die Krümmung als

$$\kappa = \nabla_t \frac{\vec{n}}{|\vec{n}|} = \nabla_t \left(\frac{\vec{\nabla} f_s}{|\vec{\nabla} f_s|} \right) \quad (2.2)$$

formuliert und die erforderlichen Ableitungen meist mittels Finiten Differenzen aus dem Feld der Festphasenanteile bestimmt. In den in den letzten Jahren aufkommenden dreidimensionalen Modellen [7, 24] wurde diese Methode mit Hilfe des Cahn-Hoffman-Vektors ([39, 40], aufbauend auf [41, 42]), welcher Grenzflächenanisotropie und Krümmung in sich vereint, weiterentwickelt.

Abseits der Erstarrungssimulation findet sich in der Fluidodynamik mit der Höhenfunktion (HF) noch eine weitere Methode, die im Vergleich zu rekonstruierenden Methoden bessere Ergebnisse für die Krümmungsberechnung liefert [43]. Dabei wird die Grenzfläche lokal als Funktion $y(x)$ oder $x(y)$ angepasst und die Krümmung von dieser berechnet. Diese Methode wurde zuerst angewendet von Poo et al. [44], erfreut sich lebhafter Anwendung in der Fluidodynamik und wird auch in Details weiterentwickelt (andere Gitterformen [45], geometrische Spezialfälle [46–48]).

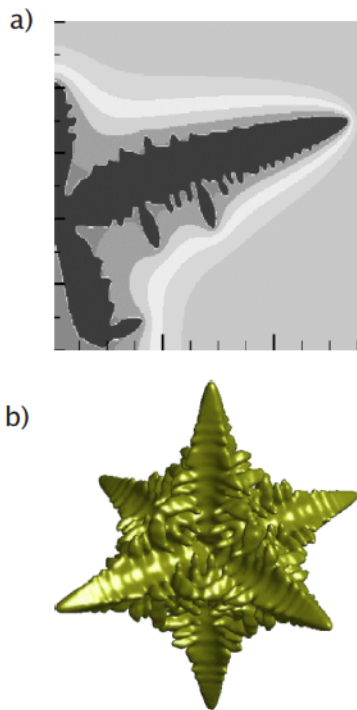


Abbildung 2.4.: Simulierte Einzeldendriten aus der Literatur: a) [6] Fe-C, Abkühlung der Domäne durch die linke Wand, Breite 600 Zellen, *Graustufen* stellen das Konzentrationsfeld dar; b) [24] unterkühltes Fe-C, Simulationsdomäne 250^3 Zellen.

Eine Problemstellung, die in allen veröffentlichten Methoden zur Geometrieberechnung ausgelassen wird, ist die Erkennung aufeinander zulaufender Grenzflächen. Befindet sich innerhalb der Umgebung, die für den Zell-zähl-Algorithmus oder die Bildung der Ableitungen des Festphasenfeldes herangezogen wird, eine weitere Grenzfläche, die jedoch zu einem anderen Teil des Dendriten oder gar einem anderen Dendriten gehört, so werden die Berechnungen verfälscht. Diese Problematik wird jedoch in keiner Publikation aufgegriffen.

2.1.7. Simulierte Dendriten aus der Literatur

In den Abbildungen 2.4 und 2.5 sind repräsentative Ergebnisse aus der Literatur dargestellt. Die Abbildungen sind dabei den Arbeiten [6], [14] und [24] entnommen, die teilweise aufeinander aufbauen. [6] verwendet zur Berechnung der Grenzflächenbewegung den Zwei-Grenzflächen-Ansatz. Die Zustandsänderung erfolgt über den in jener Arbeit entwickelten Front Tracking-Ansatz. Dies ist darüberhinaus eine der Arbeiten mit dem Versuch der Korrektur der Anisotropie, in diesem Fall durch krümmungsabhängige Einschränkung des Wachstums. [14] baut auf dieser Arbeit auf und verwendet dessen Front Tracking-Methode. Zur

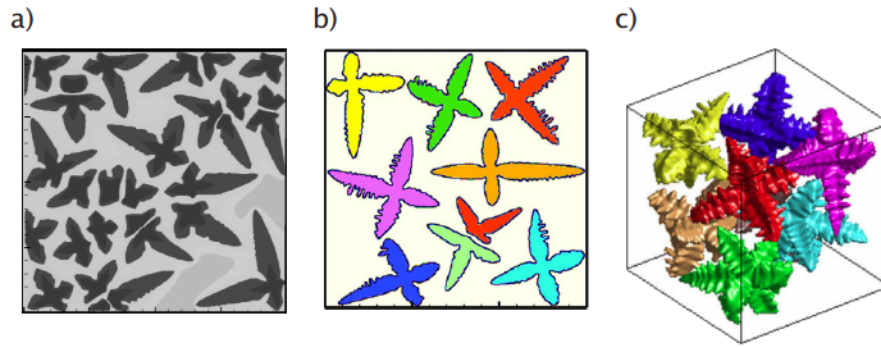


Abbildung 2.5.: Simulierte Dendritenfelder aus der Literatur: a) [6] Al-Cu, Abkühlung durch die Domänenwände, Seitenlänge 1000 Zellen, *Graustufen* stellen wieder das Konzentrationsfeld dar; b) [14] Al-Cu, Abkühlung 5K/s, Seitenlänge 600 Zellen; c) [24] Al-Cu, Abkühlung 5K/s, Simulationsdomäne 250^3 Zellen.

Berechnung der Veränderung des Festphasenanteils kommt allerdings ein Massenbilanzansatz zum Einsatz. [24] ist wiederum im Wesentlichen die Erweiterung dieses Modells auf drei Dimensionen. Die Front Tracking-Methode wurde dabei nicht auf drei Dimensionen erweitert, stattdessen findet die Veränderung des Phasenzustandes in der von-Neumann-Umgebung einer erstarrenden Grenzflächenzelle statt. Zur Berechnung der Grenzflächengeometrie wird in allen drei Methoden der Level-Set-Ansatz mit Finiten Differenzen eingesetzt.

Ein wiederkehrender Simulationsfall ist das Wachstum eines frei wachsenden gleichachsigen Dendriten. Bezeichnenderweise wird dabei die Wachstumsrichtung meist in Gitterrichtung ausgerichtet, eine tatsächliche Untersuchung des Wachstums abseits der Gitterrichtung findet nur selten statt. In Abbildung 2.4a (aus [6]) wurde ein solcher Dendrit mit einem Winkel von 15° zur Gitterrichtung simuliert. Dieser hält seine bevorzugte Wachstumsrichtung insbesondere zu Beginn sehr gut ein, allerdings dreht sich seine Wachstumsrichtung später wieder in Richtung der Gitterrichtung. Gleichzeitig fällt auch das ungleichmäßige und sehr dünne Sekundärarmwachstum zu beiden Seiten des Primärarms auf. In der Originalarbeit wurde dieses Verhalten durch die Beeinflussung der oberen Domänenwand begründet. Wie in der Abbildung zu sehen, interagiert das Konzentrationsfeld allerdings noch nicht signifikant mit der oberen Domänenwand, dieser Effekt ist also tatsächlich ein Effekt der Gitteranisotropie.

Bei Simulationen in Gitterrichtung, wie z.B. in Abbildung 2.4b (aus [24]) zeigt sich hin-

gegen ein gleichmäßiges Wachstum der Sekundärarme. Es fallen bei dieser Simulation die sehr stark gekrümmten Dendritenspitzen sowie die relativ schwach und spät auftretenden Sekundärarme auf.

Ein anderer, häufiger simulierter Fall ist die Interaktion mehrerer Dendriten unterschiedlicher Orientierung (Abbildung 2.5). Dabei wird die Keimdichte im Allgemeinen recht hoch gewählt, sodass die wachsenden Dendriten schon in Frühstadien ihrer Erstarrung miteinander interagieren. Sekundärarmwachstum tritt dabei meist nur in sehr geringem Maße auf. Dadurch wird der Einfluss der Gitteranisotropie etwas verdeckt, ist aber noch zu erkennen. Es lässt sich eine Abhängigkeit der Wachstumsgeschwindigkeit von der Orientierung erahnen, und ebenso, dass Wachstumsrichtungen abseits der Gitterrichtungen nicht immer eingehalten werden. Diese Effekte lassen sich jedoch aufgrund der hohen Keimdichte bei den veröffentlichten Ergebnissen nur schwer von tatsächlich physikalischen Effekten, wie “soft impingement” separieren. Bei der dreidimensionalen Simulation (Abbildung 2.5c) scheint die Gitteranisotropie tatsächlich einen geringeren Einfluss zu haben als in zwei Dimensionen, zumindest zeigen die Dendriten trotz der doch geringen Ortsauflösung von 250 Zellen pro Seite, soweit das bei ihrer geringen Länge erkennbar ist, eine konsistente Einhaltung ihrer Wachstumsrichtung.

2.1.8. Zusammenfassung

Als das größte Hindernis auf dem Weg zu einem physikalischen Modell hat sich die Gitteranisotropie erwiesen. Trotzdem (oder auch genau deswegen) wird das Problem in den meisten Publikationen nicht einmal erwähnt. Dennoch haben die meisten Variationen der Zelluläre Automaten-Methodik immer auch eine Verringerung der Gitteranisotropie zum Ziel. Eine tatsächliche Diskussion der Fehlerquellen in Zellulären Automaten zur Dendritensimulation fand im Wesentlichen allerdings nicht statt. Zudem stehen eine schlüssige Behandlung des Schmelzens sowie ein Algorithmus für die Berücksichtigung sich annähernder Grenzflächen für die Geometrieberechnung noch aus. Ebenso ist zwar die Level-Set-Methode zur Berechnung der Grenzflächengeometrie etabliert, es kann jedoch davon ausgegangen werden, dass sie nicht das Optimum darstellt.

2.2. Gitterlose Methoden

Gitterlose Methoden stellen eine jüngere Klasse an Methoden zur Lösung von Differentialgleichungen dar, welche zuerst in den 1970er Jahren in Form der geglätteten Teilchenhydrodynamik (smoothed particle hydrodynamics) [49] auftauchten, jedoch erst in den 1990er Jahren größere Aufmerksamkeit bekamen.

Gitterlose Methoden unterscheiden sich von den “klassischen” Lösungsmethoden (wie Finite Elemente, Finite Volumen bzw. Finite Differenzen), indem bei ihnen der Simulationsraum nicht in nichtüberlappende Flächen- bzw. Volumenelemente eingeteilt ist, sondern durch eine Punktmenge repräsentiert wird, auf denen die Werte des gesuchten Feldes lokalisiert sind. Diese Punktmenge muss im Prinzip weder bestimmten geometrischen Anforderungen genügen noch ist ein Gitter, also eine Konnektivität dieser Punkte vonnöten.

Gitterlose Methoden bestehen aus zwei Grundbausteinen: Eine Interpolationsmethode, um aus der Punktmenge ein stetiges bzw. bis zur gewünschten Ordnung differenzierbares Feld zu konstruieren, sowie eine Integrationsmethode, welche die zu lösende partielle Differentialgleichung in eine gewöhnliche Differentialgleichung der Zeit (für Anfangswertprobleme) oder ein Gleichungssystem (für Randwertprobleme) umwandelt. Die grundlegenden Funktionsweisen beider Elemente sollen im Folgenden anhand der generalisierten Wärmeleitungsgleichung

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \Delta C \quad (2.3)$$

erläutert werden. Dieser Exkurs lehnt sich an ein Standardwerk über Gitterlose Methoden “The Meshless Local Petrov-Galerkin (MLPG) Method” von Atluri und Shen [50] an.

2.2.1. Grundlagen: Gitterlose Interpolationsmethoden

Das gesuchte stetige Feld C wird mittels der Interpolationsmethoden als (im Allgemeinen lineare) Funktion der Punktwerte u_i dargestellt, deren Koeffizienten ortsabhängig sind:

$$C(\vec{x}) = f(\mathbf{u}, \vec{x}) = \sum_i \varphi_i(\vec{x}) u_i = \boldsymbol{\varphi}^T(\vec{x}) \mathbf{u} \quad (2.4)$$

Die Komponenten des Vektors $\boldsymbol{\varphi}$ werden dabei als “Formfunktionen” bezeichnet. Sind die Formfunktionen so beschaffen, dass sie lediglich in einer gewissen Umgebung um ihren zugehörigen Punkt nicht verschwinden, besitzt die Interpolation lokalen Charakter, da im Umkehrschluss lediglich diejenigen Punkte Einfluss auf die Interpolation an einem beliebigen Punkt haben, die ihn in ihrer Umgebung beinhalten. Das interpolierte Feld besitzt denselben Grad der Differenzierbarkeit wie die Formfunktionen. Bei lokalen Formulierungen müssen daher die Formfunktionen auch am Rand ihrer Umgebung, an dem sie verschwinden, bis zum gewünschten Grad stetig differenzierbar sein.

Die rechte Seite von (2.3) kann mittels der Ableitungen der Formfunktionen dargestellt werden:

$$\Delta C|_{\vec{x}} = \sum_i \Delta \phi_i(\vec{x}) u_i = \sum_i (\Delta \varphi)_i(\vec{x}) u_i = (\Delta \boldsymbol{\varphi})(\vec{x}) \mathbf{u} \quad (2.5)$$

Die Funktionen $(\Delta \varphi)_i$ sind dabei die Formfunktionen der zweiten Ableitung.

Drei lokale Interpolationsmethoden, die in dieser Arbeit Verwendung finden, sollen im Folgenden kurz vorgestellt werden. Ihre mathematische Beschreibung ist dem Anhang zu entnehmen. Sie schließen das Feld der Interpolationsmethoden natürlich nicht ab, stellen aber die einfacheren Varianten dar. Weitere Methoden können dem oben genannten Lehrbuch entnommen werden.

Radiale Basisfunktionen (RBF)

Bei der RBF-Interpolationsmethode besteht die Formfunktion des Punktes \vec{x}_i aus einer vorgegebenen radialen Funktion R um diesen Punkt herum, sowie einem unbekannten Koeffizienten:

$$\varphi_i(\vec{x}) = a_i R(|\vec{x} - \vec{x}_i|) \quad (2.6)$$

Die Koeffizienten können mittels des sogenannten Interpolationskriteriums bestimmt werden. Dieses besagt, dass das interpolierte Feld am Ort eines Punktes \vec{x}_i seinen Punktwert u_i annehmen soll. Daraus folgt ein lösbares lineares Gleichungssystem mit Gleichungen der Form:

$$u_i \stackrel{!}{=} C(\vec{x}_i) = \sum_j a_j R(|\vec{x}_i - \vec{x}_j|) \quad (2.7)$$

Aus diesem können die unbekannten Koeffizienten a_j berechnet werden, und das Feld sowie seine Ableitungen in der gewünschten Form dargestellt werden. Eine detaillierte Ausführung findet sich im Anhang (B.3.1).

Wird die Funktion $R(x)$ so gewählt, dass sie außerhalb eines bestimmten Radius R_0 verschwindet $R(x) = 0 \quad x > R_0$, so erhält diese Interpolationsmethode lokalen Charakter. Das zu lösende Gleichungssystem erhält in diesem Fall die Form einer Bandmatrix.

Gleitende gewichtete kleinste-Quadrate-Anpassung (GWQ)

Bei dieser Interpolationsmethode wird das stetige Feld durch eine gewichtete kleinste-Quadrate-Anpassung über die Punkte und ihre Werte beschrieben. Wie im Anhang (B.3.2) ausgeführt, kann auch eine solche Anpassung in der Form von Formfunktionen, also als Linearkombination der Punktwerte mit ortsabhängigen Koeffizienten, dargestellt werden. Im Gegensatz zur RBF wird bei dieser Methode das Interpolationskriterium nicht erfüllt, da eine kleinste-Quadrate-Anpassung im Allgemeinen nicht die zugrundeliegenden Punkte schneidet.

Für die Berechnung der Werte der Formfunktionen an einem Punkt ist ein Gleichungssystem mit so vielen Unbekannten zu lösen, wie Variablen angepasst werden. Die Koeffizienten dieses Gleichungssystems bestehen dabei aus Summen über die teilnehmenden Punkte. Diese Interpolationsmethode erhält lokalen Charakter, wenn die Wichtungsfunktion, die für die Anpassung verwendet wird, außerhalb einer bestimmten Umgebung verschwindet. Dadurch wird lediglich die Länge der berechneten Summen verändert.

Da die Differenzierbarkeit der resultierenden Formfunktion das Maximum der Differenzierbarkeiten der Wichtungsfunktion und der gewählten Funktionenbasis ist, kann diese Basis bei geeigneter Wahl der Wichtungsfunktion auch sehr klein gewählt werden, bis hin zur Anpassung einer Konstanten.

Für die Formfunktionen der Ableitungen zur Lösung des Gleichungssystems durch Matrixinversion kommen, im Gegensatz zur RBF, noch eine größere Anzahl Matrix-Matrix-Multiplikationen hinzu. Je nach Wahl der Größe der Umgebungen besitzt also die RBF- oder die GWQ- einen geringeren Rechenaufwand: Für Simulationsdomänen mit wenigen Punkten ist die RBF schneller, während für große Domänen die GWQ Rechenvorteile

besitzt.

Diffuse Approximationsmethode (DAM)

Die DAM ist zwar in ihrer mathematischen Formulierung mit der GWQ-Methode verwandt, verfolgt allerdings einen anderen konzeptionellen Ansatz. Im Gegensatz zu den beiden bisher vorgestellten Methoden formuliert sie kein überall auf der Simulationsdomäne konsistentes und stetiges Feld, um die Ableitungen zu berechnen. Stattdessen werden lokal die Koeffizienten einer Taylor-Reihe der gewünschten Ordnung durch eine gewichtete kleinste-Quadrate-Anpassung bestimmt, und die lokale Ableitung aus dieser berechnet. Die Ableitungen lassen sich dabei ebenso als Formfunktionen $\varphi_t(\vec{x})$ und $(\Delta\varphi)_t(\vec{x})$ darstellen, aber es gilt im Gegensatz zu den anderen beiden Methoden $(\Delta\varphi)_t \neq \Delta\varphi_t^\downarrow$.

Der lokale Charakter dieser Interpolationsmethode wird ebenso wie bei der GWQ-Methode durch die Wahl der Wichtungsfunktion der Anpassung bestimmt. Durch die Verwendung der angepassten Parameter der Taylor-Reihe ist im Unterschied zur GWQ der Rechenaufwand für jede gewünschte Ableitung derselbe. Im Gegensatz zur GWQ muss die Taylorreihe allerdings bis zum gewünschten Grad angepasst werden.

2.2.2. Grundlagen: Integration der Wärmeleitungsgleichung

Ziel der Integrationsmethoden ist es, nach Gleichung (2.3) und mit Hilfe der Formfunktionen aus den Werten u_t^t aller Punkte \vec{x}_t zum Zeitpunkt t die Werte $u_t^{t+\Delta t}$ zum nächsten Zeitschritt zu berechnen. Dazu sind im Wesentlichen zwei Verfahren gebräuchlich: Die schwache Formulierung, wie sie auch bei der Finite-Elemente-Methode zur Anwendung kommt, sowie die Kollokation.

Schwache Formulierung

Innerhalb einer Teildomäne Ω_t ist eine Funktion $C(\vec{x}, t)$ eine sogenannte schwache Lösung der Differentialgleichung (2.3), wenn sie die Gleichung

$$\int_{\Omega_t} v_t \frac{\partial C}{\partial t} dA = \int_{\Omega_t} v_t \Delta C dA \quad (2.8)$$

für beliebige “Testfunktionen” $v_t(\vec{x})$ erfüllt. Setzt man die Interpolation mittels Formfunktionen aus einer der vorgestellten Methoden ein, so erhält man:

$$\int_{\Omega_t} \left(\sum_j \frac{\partial u_j}{\partial t} \varphi_j \right) v_t dA = \int_{\Omega_t} \left(\sum_j u_j (\Delta \varphi)_j \right) v_t dA \quad (2.9)$$

bzw. durch Vertauschen von Summe und Integral

$$\sum_j \frac{\partial u_j}{\partial t} \int_{\Omega_t} \varphi_j v_t dA = \sum_j u_j \int_{\Omega_t} (\Delta \varphi)_j v_t dA \quad (2.10)$$

Die Integrale können auf eine beliebige Weise numerisch gelöst werden, und man erhält eine lineare gewöhnliche Differentialgleichung der Knotenwerte und ihrer Zeitableitungen. Stellt man diese Gleichung für so viele unterschiedliche Domänen auf, wie Punkte vorhanden sind, so erhält man ein lösbares System linearer gewöhnlicher Differentialgleichungen. Eine genaue mathematische Beschreibung am Beispiel der in dieser Arbeit angewandten expliziten Zeit-vorwärts-Integration findet sich im Anhang (B.4.3).

Durch partielle Integration der rechten Seite von (2.10) kann diese Form der Integration die Wärmeleitungsgleichung selbst mit nur einfach differenzierbaren Formfunktionen lösen. Mittels der Gaußschen Integralsätze lässt sich darüber hinaus eine einfache Implementierung der Neumannschen Randbedingungen erreichen. Dirichletsche Randbedingungen sind mit der schwachen Formulierung hingegen nicht exakt zu erfüllen, sondern benötigen zusätzliche Lagrangesche “penalty”-Terme.

Kollokation

Bei der Kollokation wird von der Lösung $C(\vec{x}, t)$ lediglich erwartet, dass sie an bestimmten Testpunkten \vec{x}_t die Differentialgleichung erfüllt:

$$\left. \frac{\partial C}{\partial t} \right|_{\vec{x}_t} = \Delta C|_{\vec{x}_t} \quad (2.11)$$

Durch Einsetzen der Formfunktionen erhält man wieder eine lineare Gleichung der

Punktwerte und ihrer Ableitungen:

$$\sum_j \frac{\partial u_j}{\partial t} \varphi_j(\vec{x}_i) = \sum_j u_j (\Delta \varphi)_j(\vec{x}_i) \quad (2.12)$$

Stellt man diese Gleichung wieder für ebensoviele Testpunkte auf, wie Punkte der Domänenrepräsentation vorhanden sind, so ergibt sich wiederum ein lösbares lineares System gewöhnlicher Differentialgleichungen. Die Testpunkte können im Prinzip beliebig gewählt werden, im Allgemeinen wird dabei jedoch auf die Menge der Domänenpunkte zurückgegriffen. Auch von der Anwendung dieser Methode findet sich eine mathematische Beschreibung im Anhang (B.4.3).

Im Gegensatz zur schwachen Formulierung erlaubt diese Integrationsmethode eine exakte Erfüllung von Dirichletschen Randbedingungen, benötigt jedoch wiederum zusätzliche Konzepte für Randbedingungen Neumannscher Art.

2.2.3. Gitterlose Methoden für nichtstationäre Diffusionsprobleme

Gitterlose Methoden wurden als Ersatz für Finite-Elemente-Methoden eingeführt. Deshalb werden sie in der Literatur meist für stationäre Problemstellungen der Mechanik oder Fluidodynamik eingesetzt, während Diffusionsprobleme, speziell nichtstationäre, in der veröffentlichten Literatur eine untergeordnete Rolle spielen.

In den veröffentlichten Modellen zur Diffusionsberechnung wird als Interpolationsmethode zumeist die GWQ eingesetzt [51–59], während RBF-Methoden eher seltener gewählt werden [60–65]. Vereinzelt finden auch andere Methoden wie ungewichtete kleinste Quadrate [66], DAM [59, 67, 68] oder RKPM-Methoden (“Reproducing Kernel Particle Methods” - Reproduzierende Kerne auf Partikeln) [69] Anwendung. In der weit überwiegenden Zahl der Fälle wird dabei die jeweils lokale Variante der Interpolation eingesetzt.

Zur Integration der Differentialgleichung wird Kollokation in ähnlichem Maße wie die schwache Formulierung eingesetzt. Hervorzuheben ist dabei ein hybrider Ansatz [55], der in Randnähe die schwache Formulierung einsetzt, während innerhalb der Domäne die ein-

fachere Kollokation angewendet wird. Ein Ansatz ebenfalls eher untergeordneter Bedeutung ist die kleinste-Quadrate-Kollokation [52]. Bei dieser wird die Differentialgleichung an einer größeren Anzahl Kollokationspunkten integriert, als Punkte mit Funktionswert vorhanden sind. Auf diese Weise entsteht ein überbestimmtes Gleichungssystem für die Punktwerte, welches wiederum mittels kleinster-Quadrate-Anpassung gelöst wird.

Die weit überwiegende Mehrheit derjenigen veröffentlichten Diffusionsmodelle, die auch nichtstationäre Zustände berechnen, setzt zur Integration der gewöhnlichen Differentialgleichung der Zeit implizite oder semiimplizite Methoden (Theta-Methode, Crank-Nicholson) ein. Da wie oben beschrieben zur Lösungsfindung in jedem Fall ein lineares Gleichungssystem für alle unbekannten Punktwerte aufgestellt werden muss, erhöht diese Art der Integration den Rechenaufwand nicht mehr signifikant. Vereinzelt wird jedoch auch die explizite Zeitintegration eingesetzt [51, 63, 65], bevorzugt in Verbindung mit der RBF-Interpolation. In [53] wurde festgestellt, dass der maximale stabile Zeitschritt bei expliziter Zeit-vorwärts-Integration bei der schwachen Formulierung ungefähr eine halbe Größenordnung unter dem bei Kollokation liegt.

In [69] (stationär, RKPM) wurde die Tatsache, dass die gewählte Interpolation das Interpolationskriterium nicht erfüllt, also die interpolierte Lösung die Datenpunkte nicht genau trifft, als Qualitätsmaß herangezogen: An Stellen, an denen die Abweichung der Interpolation vom Punktwert ein gewisses Maß überschritt, wurden sukzessive weitere Punkte eingeführt. Da die in dieser Arbeit verwendete lokale Nachbarschaft eine konstante Menge an Punkten voraussetzte, wurde auf diese Weise die lokale Auflösung an die Lösung angepasst. Auch hier wurden lediglich statische Probleme untersucht.

In [59] findet sich ein quantitativer Vergleich zwischen verschiedenen gitterlosen Methoden (DAM mit Kollokation und GWQ mit schwacher Formulierung) und klassischen Methoden (FEM und FD). Dabei zeigte sich, dass die gitterlosen Methoden den klassischen Methoden in Bezug auf Konvergenzverhalten und Fehlerniveau durchaus ebenbürtig sind.

In [51] (GWQ, Kollokation) wurde der maximale stabile Zeitschritt bei expliziter Zeit-vorwärts-Integration für eine gitterlose Methode untersucht. Dabei wurde in Analogie zu FD und FEM eine quadratische Abhängigkeit des Zeitschritts mit charakteristischen Längenskalen der Simulation vorausgesetzt. Es zeigte sich, dass lokale Interpolationsmethoden

einen geringeren Zeitschritt zulassen als ihre globalen Varianten. Andererseits korrelierte der maximale stabile Zeitschritt nur schwach mit der Größe der Nachbarschaft im Verhältnis zum Knotenabstand. Des Weiteren wurde ein linearer Zusammenhang zwischen Größe des Zeitschritts und dem (mittleren quadratischen) Fehler gefunden.

Im Zuge der Parameteranalyse in [56] (GWQ, schwache Formulierung) wurde ohne weitere Erläuterung ein linearer Zusammenhang zwischen dem maximalen stabilen Zeitschritt und dem “mittleren” Teilchenabstand (eines durch Verschiebung erzeugten irregulären Gitters, siehe 2.2.4) postuliert.

In [70] (DAM, stationär) wurden verschiedene Varianten der DAM mit unterschiedlichen Ordnungen untersucht. Dabei zeigte sich, dass eine kleinste-Quadrate-Anpassung einer vollständigen monomischen Basis vierter Ordnung eine signifikante Senkung des Fehlers gegenüber der meist verwendeten monomischen Basis zweiter Ordnung ermöglicht. Quantitativ zeigte sich ein annähernd quadratisches Konvergenzverhalten für die Basis zweiter Ordnung, und für die Basis vierter Ordnung entsprechend ein Konvergenzverhalten vierter Ordnung. Allerdings erhöht sich mit Erhöhung der Ordnung der Basis gleichzeitig der Rechenaufwand enorm, da für jede Interpolation eine Matrix mit der Größe der Basis als Dimension invertiert bzw. gelöst werden muss. Die Größe der Basis hängt wiederum quadratisch von deren Ordnung ab.

2.2.4. Irreguläre Punktverteilungen für gitterlose Methoden

Obwohl in der Literatur verschiedene Punktverteilungen eingesetzt werden, existieren so gut wie keine Arbeiten über deren Einfluss auf das Simulationsergebnis. Die mit gitterlosen Methoden eingesetzten Punkteverteilungen können in vier Klassen eingeteilt werden. Absteigender Häufigkeit nach sind dies:

1. Regelmäßige, kartesische Punktgitter,
2. Sogenannte “irreguläre” Punkteverteilungen, die durch Verschiebung aller Punkte eines regelmäßigen kartesischen Gitters um einen zufälligen Wert in x- und y-Richtung [4] erzeugt werden. Für die zufälligen Bewegungen sind dabei Amplituden zwischen 10% und 45% des Gitterabstandes gebräuchlich [56, 59, 63, 65, 68, 71],

3. Tatsächlich zufällige Verteilungen, wobei meist über deren Entstehung keinerlei Aussage getroffen wird. [72, 73]. Teilweise werden sie aus Triangulationsalgorithmen erzeugt [64, 74], in anderen Fällen treten kornähnliche Strukturen [75] oder gemischt zufällige und geordnete Bereiche [76] auf,
4. Sogenannte “irreguläre” Punkteverteilungen, die der Lösung des Problems angepasst sind. An Stellen, an denen ein größeres Auflösungsvermögen der Methode benötigt wird (große zweite Ableitung der Lösung), wird das Gitter gestaucht. Alternativ werden bei Bedarf im Laufe der Simulation zusätzliche Punkte auf Zwischenplätze in ein reguläres Gitter eingefügt [58, 59, 62, 71, 72, 77, 78].

In allen Arbeiten, in denen tatsächlich Ergebnisse auf irregulären Gittern, insbesondere der zweiten und dritten Art, mit denen auf regulären Gittern verglichen werden, wird ein allgemein höheres Fehlerniveau der Rechnungen auf den irregulären Gittern festgestellt, bis hin zu Divergenz [71]. Divergierendes Verhalten wurde in jener Arbeit damit begründet, dass Punkte durch Verschiebung mit großer Amplitude sehr nah beieinander liegen können. Im Allgemeinen wird jedoch festgestellt, dass das Niveau des Fehlers durch Benutzung eines irregulären Gitters gegenüber der Simulation auf einem regelmäßigen Gitter um eine halbe bis ganze Größenordnung erhöht ist.

2.2.5. Gitterlose Methoden mit sich bewegende Grenzflächen

Die Anzahl an Veröffentlichungen, welche Probleme mit sich bewegenden Grenzflächen mittels gitterlosen Methoden behandeln, liegt im niedrigen zweistelligen Bereich. Im Wesentlichen finden dabei zwei verschiedene Ansätze Anwendung, nämlich entweder eine direkte Repräsentation der Grenzfläche durch sich bewegende Punkte oder eine indirekte Repräsentation als Niveaukurve einer Fläche auf einer starren Punktmenge.

Direkte Repräsentation der Grenzfläche

Der Ansatz, die Grenzfläche direkt durch bewegliche Punkte zu repräsentieren wird vor allem für Probleme einer Domäne mit einer freien Grenzfläche behandelt, z.B. Wasserwellen unter Randbedingungen [79–82] oder das Verhalten von Blasen in einer Strömung [63], allerdings ist auch eine Anwendung für die makroskopische Gießereisimulation veröffentlicht [83]. Bei diesem Ansatz wird die Front durch bewegliche Punkte, die Domäne hingegen durch einen anderen, meist fixen Satz an Punkten repräsentiert. Bei den annähernd isochoren Problemen (Wasserwellen, Blasen) ist die Anzahl der Domänenpunkte meist in der selben Größenordnung wie die Anzahl der Grenzflächenpunkte. Diese sind wahlweise selbst beweglich und in der Nähe der Front [63], oder aber stationär an den unbeweglichen Rändern der Domäne positioniert [79, 80, 82]. Alternativ ist die Domäne mit einer regelmäßigen (kartesischen) Anordnung an Punkten überdeckt [81], in welche bei Wachstum der Domäne neue Punkte eingefügt werden [83]. Die Bewegung der Grenzfläche wird dabei in den meisten Fällen durch eine explizite Zeit-vorwärts-Integration berechnet [79–81, 83], selbst wenn das Verhalten des zugrundeliegende Feldes mittels (semi-)impliziter Zeitintegration berechnet wird. Lediglich ein Modell [82] benutzt einen einstufigen Iterationsalgorithmus, um eine verbesserte Konsistenz zwischen der Entwicklung des zugrundeliegenden Feldes und der bewegenden Grenzfläche zu erreichen.

Eine Sonderstellung nimmt hier das Modell von La Rocca und Power [84] für das Wachstum eines Dendritenarms in einem Kanal ein: Bei diesem bewegt sich eine konstante Menge an Grenzflächenpunkten über eine Domäne, die durch ein fixes Punktgitter repräsentiert wird, hinweg. Für die Lösung der Diffusionsgleichung in der flüssigen Phase werden dabei alle Punkte der Domäne verwendet. Die Punkte, die sich hinter der Grenzfläche (und damit im festen Gebiet) befinden, dienen dabei der “externe Erweiterung der Lösung”, stellen also eine Erweiterung der Lösung über ihre eigentliche Definitionsmenge hinaus dar, welche die Qualität der Gesamtlösung verbessern soll. Auf diese Weise wird gleichzeitig die Notwendigkeit einer Prüfung der Phasenzugehörigkeit der Domänenpunkte vermieden. Andererseits wird dafür die Diffusion in der festen Phase komplett vernachlässigt. Für die Berechnung der Grenzflächengeometrie wird die Tatsache herangezogen, dass die bewegten Gitterpunkte geordnet sind, sodass dafür FD-Methoden zur

Anwendung kommen. Durch die auftretende Deformation der Grenzfläche müssen die sich bewegendenden Punkte während der Simulation immer wieder neu auf die Grenzfläche verteilt werden. Bei starker Grenzflächendeformation wurde instabiles Verhalten des Modells festgestellt. Auch bei diesem Modell werden die Grenzflächenpunkte nach einer expliziten Zeit-vorwärts-Integration bewegt, während das Diffusionsproblem implizit gelöst wird.

Indirekte Repräsentation der Grenzfläche

Die meisten gitterlosen Methoden für (meist thermische) Erstarrungsprobleme setzen auf ein-Domänen-Formulierungen, insbesondere die Enthalpie-Methode bzw. Mischungs-Formulierung [57, 85, 86]. Dabei wird das Problem der Diffusion der Wärme umformuliert in ein Problem der Diffusion der Enthalpie. Deren Sprung am Schmelzpunkt wird mittels einer als stetig mit der Temperatur veränderlich angesetzten Wärmekapazität in einen stetigen Übergang über einen kleinen Temperaturbereich umgewandelt. Das daraus resultierende stetige Feld mit einer implizit einbeschriebenen Grenzfläche kann dann in der gesamten Domäne berechnet werden.

Einen verwandten Sonderfall stellt das Modell aus [87] für Blasen im Strömungsfeld dar. In diesem wird die Grenzfläche über einen Level-Set-Ansatz repräsentiert und das daraus resultierende System gekoppelter partieller Differentialgleichungen mittels radialer Basisfunktionen gelöst.

2.2.6. Zusammenfassung

Obwohl gitterlose Methoden im Prinzip auf beliebigen Punktmengen operieren können, existieren nur wenige Veröffentlichungen, die tatsächlich den Einfluss unterschiedlicher Punktanordnungen thematisieren. Eine systematische Untersuchung steht dabei noch aus. Ebenso sind die Ansätze, Probleme mit sich bewegendenden Grenzflächen zu lösen, rar gesät. Im Bereich der Hydrodynamik werden dabei vor allem Probleme mit einer freien, beweglichen Domänengrenze untersucht, welche die spezifischen Problemstellungen der quantitativen Erstarrungssimulation (zwei Domänen, bidirektionale Kopplung der Grenzfläche an das Feld durch Quellenwirkung) nicht enthalten. Bei den wenigen veröffentlichten Erstar-

rungsmodellen wird im Wesentlichen thermische Erstarrung simuliert, in der die Grenzfläche indirekt mit einer ein-Domänen-Formulierung repräsentiert wird. Ein quantitatives solutales Erstarrungsmodell, welches die spezifischen Vorteile der gitterlosen Methoden nutzt, ist in der Literatur zur Zeit (noch) nicht zu finden.

2.3. Arbeitsansatz

Ausgehend von den veröffentlichten Zelluläre-Automaten-Modellen soll in dieser Arbeit ein eigenes Modell entwickelt werden, welches besonderes Augenmerk auf die Beseitigung der Gitteranisotropie legt. Dafür soll untersucht werden, ob mit neuen Ansätzen der anisotrope Einfluss des notwendigerweise diskreten Wachstums verringert, oder gar beseitigt werden kann. Ebenso sollen die Lücken, welche die bisher veröffentlichten Modelle gelassen haben, geschlossen werden. Insbesondere soll für die Krümmungsberechnung eine Methode gefunden werden, die das Problem der mit großen Fehlern behafteten einfachen Ableitungsberechnung durch finite Differenzen umgeht.

Gleichzeitig wird der Versuch unternommen, eine qua Definition isotrope Simulationmethode zu entwickeln, die auf einer tatsächlich isotropen Diskretisierung des Raumes beruht. Dafür bieten sich gitterlose Methoden an, die im Prinzip auf beliebigen, und damit auch isotropen, Punktmengen operieren können. Zur Grenzflächenrepräsentation soll aufgrund der höheren damit erreichbaren Ortsauflösung eine Partikelmethode verwendet werden. Ein Ausgangspunkt dazu ist die Arbeit von La Rocca und Power [84].

3. Zelluläre Automaten

3.1. Mathematische Beschreibung solutaler Erstarrung

Das solutale Erstarren metallischer Legierungen kann durch zwei Grundgleichungen beschrieben werden: Zum Ersten entwickelt sich die Konzentrationsverteilung $C_{l,s}$ der gelösten Komponente innerhalb des Festkörpers und der Flüssigphase nach dem zweiten Fickschen Gesetz:

$$\frac{dC_{l,s}}{dt} = \vec{\nabla}(D_{l,s} \cdot \vec{\nabla} C_{l,s}) \quad (3.1)$$

Zum Zweiten bewegt sich die fest-flüssig-Grenzfläche mit der Geschwindigkeit v nach der Massenbilanz:

$$v = \frac{1}{C_l^\Gamma - C_s^\Gamma} \left(D_s \frac{\partial C_s}{\partial \vec{n}} \Big|_s - D_l \frac{\partial C_l}{\partial \vec{n}} \Big|_l \right) \quad (3.2)$$

Diese Bewegung findet in Richtung ihrer Normalen \vec{n} statt, welche per Konvention vom Festkörper in die Schmelze orientiert ist. Die Grenzflächenkonzentrationen $C_{s,l}^\Gamma$ sind bei hinreichend niedrigen Erstarrungsgeschwindigkeiten identisch mit den Gleichgewichtskonzentrationen $C_{s,l}^*$. Diese sind von der lokalen Grenzflächengeometrie abhängig und können aus den Liquidus- und Soliduslinien eines bekannten Phasendiagramms $C_{s,l}^P(T)$ mittels der Gibbs-Thomson-Beziehung, welche die effektive Unterkühlung der Grenzfläche aufgrund ihrer Krümmung beschreibt, berechnet werden:

$$C_{l,s}^* = C_{l,s}^P(T - \gamma(\vec{n})\kappa) \quad (3.3)$$

Dabei ist κ die lokale Krümmung der Grenzfläche, die per Konvention negativ für den Fall

einer konvexen festen Domäne definiert ist. γ ist die lokale Grenzflächenenergie, die anisotrop und damit richtungsabhängig ist. Sie kann in einer Näherung erster Ordnung durch den Gibbs-Thomson-Koeffizienten γ^0 und den ersten Entwicklungsparameter der Oberflächenspannung für vierzählige Symmetrie ε beschrieben werden. In zwei Dimensionen lautet diese Beschreibung für ein Material mit vierzähliger Symmetrie:

$$\gamma = \gamma^0 [1 - 15\varepsilon \cos(4[\Theta_0 - \arccos n_x])] \quad (3.4)$$

Dabei beschreibt Θ_0 den Winkel der bevorzugten Wachstumsrichtung des festen Materials zur x -Achse des Simulationsraumes.

3.2. Das zelluläre Automaten-Modell

3.2.1. Gitter und Zustandsgrößen

Das implementierte Modell wird im Folgenden für zwei Dimensionen beschrieben. Im Allgemeinen wurden alle Algorithmen so gewählt, dass sie sich ohne prinzipielle Änderungen auf drei Dimensionen erweitern lassen.

Die dem Modell zugrundeliegende Raumaufteilung folgt den in der Literatur gebräuchlichen zelluläre Automaten-Modellen für solutale Erstarrung: Das vorliegende Modell ist auf einem regelmäßigen, kartesischen Punktgitter $\vec{x}^{t,j} = (x^{t,j}, y^{t,j})$ mit Gitterbreite $\Delta x = \Delta y$ definiert. Jedem Punkt sind die Größen $C_l^{t,j}$ und $C_s^{t,j}$ sowie $f_s^{t,j}$ zugeordnet. Diese Größen beschreiben den physikalischen Zustand in einer quadratischen Teilfläche der simulierten Domäne. Für die Simulation wird des Weiteren noch die Phasenzugehörigkeit $p^{t,j}$ (fest, flüssig, Grenzfläche), die Normalenrichtung $\vec{n}^{t,j}$ sowie die Zusammengehörigkeit benachbarter Zellen $s_{k,l}^{t,j}$, $k, l \in \{-1, 0, 1\}$ (siehe 3.2.5) in der Datenstruktur gespeichert.

3.2.2. Physikalische und numerische Einheiten

Das Modell ist dimensionslos implementiert. Durch die vereinfachten Gleichungen wird sowohl der Rechenaufwand verringert als auch die Lesbarkeit erhöht. Für die Abstände

zwischen zwei benachbarten Zellen gilt daher im Modell:

$$(x^{t,j} - x^{t-1,j} = \Delta x) \equiv (y^{t,j} - y^{t,j-1} = \Delta y) \equiv 1 \quad (3.5)$$

Der Zeitschritt wird im Modell ebenfalls auf $\Delta t \equiv 1$ festgelegt.

Damit sind die Diffusionskoeffizienten $D_{l,s}$ innerhalb des Modells abhängig von ihren physikalischen Größen $D_{l,s}^p$ sowie den physikalischen Werten des Gitterabstandes Δx^p und des Zeitschritts Δt^p :

$$D_{l,s} = D_{l,s}^p \cdot \frac{\Delta t^p}{(\Delta x^p)^2} \quad (3.6)$$

Für die Integration der Zeit durch Zeit-vorwärts-gerichtete finite Differenzen gilt das Stabilitätskriterium:

$$\frac{\max(D_l^p, D_s^p) \Delta t^p}{(\Delta x^p)^2} = \max(D_l, D_s) < \frac{1}{4} \quad (3.7)$$

Um möglichen Instabilitäten durch die anderen Simulationskomponenten vorzubeugen, wurde der physikalische Zeitschritt nur halb so groß gewählt, nämlich so, dass $\max(D_l, D_s) = \frac{1}{8}$. Damit gilt im Fall $D_l^p > D_s^p$: $D_l = \frac{1}{8}$ und $D_s = \frac{1}{8} \frac{D_s^p}{D_l^p}$. Der im Modell verwendete Gibbs-Thomson-Koeffizient γ^0 errechnet sich aus seinem physikalischen Wert durch

$$\gamma^0 = \frac{\gamma^{0,p}}{\Delta x^p} \quad (3.8)$$

Da die Konzentrationen auch physikalisch dimensionslos sind, wurde bei ihnen keine Umskalierung im Modell durchgeführt, sondern mit physikalischen Werten gerechnet. Ebenso wurde die Temperatur mit der physikalischen Einheit K im Modell verwendet.

3.2.3. Diffusion und Massenbilanz

In den flüssigen und festen Zellen wird die Diffusionsgleichung übereinstimmend mit der großen Mehrheit der veröffentlichten Modelle mittels finiter Differenzen zweiter Ordnung (siehe B.1.1) und expliziter Vorwärts-Zeitintegration (siehe B.4) integriert.

Für die Berechnung der Grenzflächenbewegung wurde ein neuer, hybrider Massenbilanzansatz gewählt, der die beiden in der Literatur gebräuchlichen Varianten in sich

vereint (Siehe Abschnitt 2.1.4). Die physikalische Massenbilanzgleichung (3.2) lässt sich umschreiben als:

$$\Delta N = D_s \left. \frac{\partial C_s}{\partial \vec{n}} \right|_s - D_l \left. \frac{\partial C_l}{\partial \vec{n}} \right|_l = (C_l^\Gamma - C_s^\Gamma) v \quad (3.9)$$

Dabei beschreibt die linke Seite den Fluss ΔN an Legierungsatomen in der festen (s) und flüssigen (l) Phase, je nach Vorzeichen von der Grenzfläche weg oder auf sie zu. Die rechte Seite beschreibt die Antwort des Festkörpers auf diesen Fluss: Bewegung der Grenzfläche mit gleichzeitigem Einbau bzw. Ausstoß von Legierungsatomen.

Der Fluss wird durch einseitige finite Differenzen erster Ordnung berechnet (siehe Abschnitt B.1.1). Dabei wird die Ableitung im Flüssigen mit den Zellen in Richtung der Grenzflächennormalen berechnet, der Festkörper-Term mit den Zellen in der entgegengesetzten Richtung (siehe Abbildung 3.1).

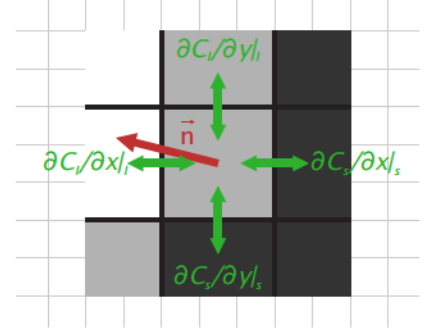


Abbildung 3.1: Berechnung der Komponenten (grün) des Atomflusses an der Grenzfläche: Mit den zwei Zellen “vor” der Normalenrichtung (rot) wird die Flüssigphasendifusionskomponente (l) berechnet, mit den zwei Zellen “dahinter” die Festphasendifusionskomponente (s).

Die Antwort der Grenzfläche auf den Atomfluss wird hingegen als Veränderung des Festphasenanteils mit Hilfe der folgenden Massenbilanz formuliert:

$$N^{i,j,t+1} = N^{i,j,t} - \Delta N \quad (3.10)$$

Die Anzahl der Atome der zweiten Komponente N innerhalb einer Zelle zur Zeit $t+1$ ergibt sich aus deren Menge N zum Zeitpunkt t abzüglich des Atomflusses aus ihr heraus. Dabei berechnet sich die Gesamtsumme an Legierungsatomen in der Zelle i, j zum Zeitpunkt t $N^{i,j,t}$ zu:

$$N^{i,j,t} = f_s^{i,j,t} C_s^{i,j,t} + (1 - f_s^{i,j,t}) C_l^{i,j,t} \quad (3.11)$$

Die Konzentrationen $C_{l,s}^{i,j,t}$ sind dabei die aktuellen Werte in der Grenzflächenzelle, die Konzentrationen $C_{l,s}^{i,j,t+1}$ die neuen Gleichgewichtskonzentrationen aus (3.3):

$$C_{l,s}^{i,j,t+1} = C_{l,s}^{*i,j,t} = C_{l,s}^*(\vec{n}^{i,j,t}, \chi^{i,j,t})$$

Daraus ergibt sich für den Festphasenanteil im nächsten Zeitschritt $f_s^{t,j,t+1}$:

$$f_s^{t,j,t+1} = \frac{f_s^{t,j,t} (C_l^{t,j,t} - C_s^{t,j,t}) + (C_l^{*,t,j,t} - C_l^{t,j,t}) + \Delta N}{C_l^{*,t,j,t} - C_s^{*,t,j,t}}$$

Auf diese Weise werden die Vorteile des Massenbilanzansatzes (wegfallende Notwendigkeit der geometrischen Interpretation der Grenzfläche innerhalb der Zelle sowie bessere Einhaltung der Massenbilanz), ausgenutzt, ohne dabei dessen Nachteil (Überschätzung der Diffusion in der Nähe von Spitzen) zu erleiden.

3.2.4. Zustandsänderungen

Wie in den meisten veröffentlichten Modellen wurde in diesem Modell die Bedingung vorausgesetzt, dass jede Grenzflächenzelle mindestens eine feste Zelle in ihrer von-Neumann-Nachbarschaft besitzt. Dafür wurde das folgende Zustandswechsel-Verfahren implementiert:

Wenn eine Zelle vollständig erstarrt ($f_s^{t,j,t+1} \geq 1$) so wird ihre Phasenzugehörigkeit zu fest geändert, und alle flüssigen Zellen in ihrer von-Neumann-Umgebung werden im nächsten Schritt wachstumsfähige Grenzflächenzellen, welche die bevorzugte Wachstumsrichtung dieser Zelle erhalten. In dem Fall, dass eine flüssige Zelle von mehreren gleichzeitig erstarrten Grenzflächenzellen unterschiedlicher Orientierung in eine Grenzflächenzelle umgewandelt werden soll, erhält sie zufällig eine derer Orientierungen.

Im Gegensatz zu den meisten veröffentlichten Modellen behandelt das vorliegende Modell auch den Vorgang des Schmelzens. Schmilzt eine Grenzflächenzelle vollständig auf ($f_s^{x,y,t+1} < 0$), so wird sie zur flüssigen Zelle und alle in von-Neumann-Umgebung umliegenden, festen Zellen werden Grenzflächenzellen.

Sollte eine Zelle gleichzeitig aufschmelzen und vom Erstarren einer benachbarten Zelle betroffen sein, so hat die Erstarrung Vorrang: Die erstarrte Zelle wird fest, und die aufgeschmolzene Zelle bleibt eine Grenzflächenzelle mit $f_s = 0$. Etwaige weitere feste Zellen um die aufgeschmolzene Zelle herum werden trotzdem Grenzflächenzellen, die jedoch in den meisten Fällen nicht weiter schmelzen können, sondern nach kurzer Zeit wieder erstarren.

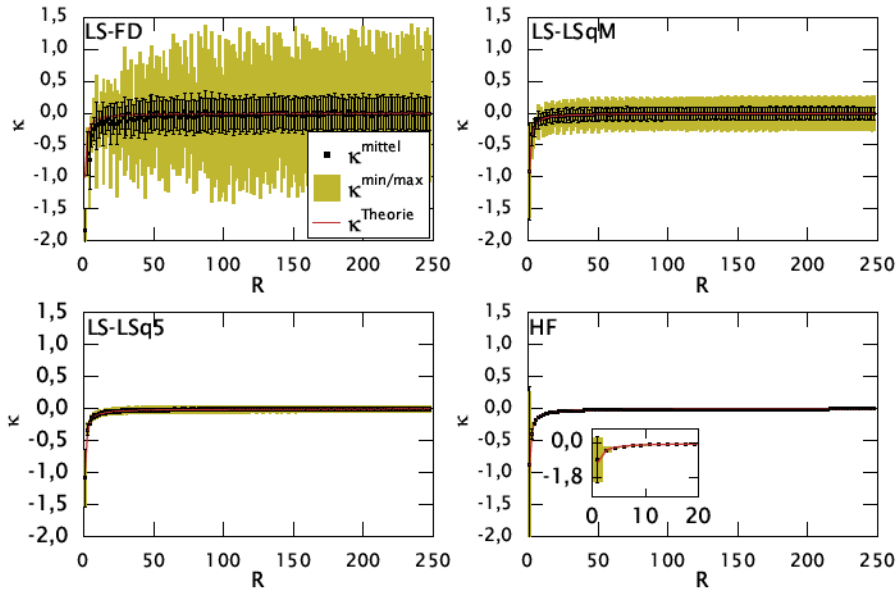


Abbildung 3.2.: Krümmungsverteilung entlang des Umfangs von Kreisen verschiedener Radien, berechnet mit vier verschiedenen Methoden (siehe Text). *Schwarze Quadrate* kennzeichnen die mittlere Krümmung über den gesamten Kreisumfang, die Fehlerbalken deren Standardabweichung. *Gelbe Balken* kennzeichnen die gesamte Streuweite an Krümmungswerten. *Rot* ist der tatsächliche Verlauf $\kappa = -\frac{1}{R}$

3.2.5. Grenzflächengeometrie: Krümmung und Normalenrichtung

Obwohl die Höhenfunktionsmethode in der Fluidodynamik relativ verbreitet ist, wurde sie bisher auf dem Feld der Dendritensimulation nicht eingesetzt. Um ihre Eignung zu überprüfen, soll sie im Folgenden quantitativ mit der in der Dendritensimulation verbreiteten Krümmungsberechnung mittels des Level-Set-Ansatzes verglichen werden (siehe B.1.3). Die für diesen benötigten Ableitungen wurden einerseits mittels Finiten Differenzen (LS-FD), andererseits mittels einer Kleinsten-Quadrate-Anpassung (LS-LSq, siehe B.2.1) berechnet: Bei dieser Anpassungsmethode wurde eine Taylorreihe bis zur zweiten Ordnung, also mit sechs Komponenten, angepasst und die Ableitungen aus dieser bestimmt. Diese Anpassung wurde in einer Moore-Umgebung (LS-LSqM) und in einer größeren Umgebung (Distanz $\leq \sqrt{5}$, entspricht 21 Zellen, LS-LSq5) durchgeführt. Es wurden zwei Testreihen mit diesen vier Methoden durchgeführt.

Quantitativer Test I: Perfekter Kreis

Für die erste Testreihe wurde jeweils ein Kreis mit Radius R in die Simulationsdomäne gelegt. In jeder Zelle wurde dann f_s als die Größe der Schnittfläche zwischen Zellfläche und Kreis berechnet. In jeder Zelle mit $0 < f_s < 1$ wurde daraufhin die Krümmung berechnet, und die Abweichung von der tatsächlichen Krümmung $-\frac{1}{R}$ statistisch über alle diese Zellen ausgewertet. Die Ergebnisse sind in Abbildung 3.2 für alle vier Berechnungsmethoden in Abhängigkeit vom Radius des Kreises dargestellt. Die Radien wurden dabei so gewählt, dass sie außer beim kleinsten Radius $R = 1$ nie ganzzahlig waren.

Die LS-FD-Methode schneidet bei diesem Test sehr schlecht ab. Stark fehlerhafte Werte gibt es insbesondere in solchen Zellen, in denen der Festphasenanteil nahe Null oder Eins liegt. Im Mittel über den gesamten Kreisumfang wird jedoch die Krümmung annähernd korrekt berechnet.

Die Kleinste-Quadrate-Methoden zeigen eine wesentlich geringere Abweichung vom theoretischen Krümmungswert. Je größer dabei die Anzahl der der Anpassung zugrundeliegenden Zellen ist, desto geringer ist die Streubreite und Abweichung vom theoretischen Wert. Gleichzeitig sinkt damit allerdings auch die Ortsauflösung.

Die Höhenfunktion zeigt bis auf die ersten zwei untersuchten Radien eine exakte Übereinstimmung mit der tatsächlichen Krümmung. Die Streuung der Krümmungswerte über den gesamten Kreisumfang liegt im Bereich des numerischen Fehlers des verwendeten Computers. Die großen Abweichungen bei den beiden kleinsten Radien sind damit zu erklären, dass die HF-Methode eine relativ große Nachbarschaft (± 3 Zellen in die dominante Normalenrichtung x oder y) erfordert. Eine zweite darin befindliche Grenzfläche, wie sie im Fall der zwei kleinsten Kreise gegeben ist, führt zu den beobachteten Abweichungen.

Quantitativer Test II: Abgeschnittener Kreis

Bei dem vorangegangenen Test kann es dazu kommen, dass “Grenzflächen”-Zellen keine feste Zelle in ihrer von-Neumann-Umgebung besitzen. Dies ist jedoch kein gültiger Zustand für das ZA-Modell, welches vorschreibt, dass jede Grenzflächenzelle mindestens eine feste Zelle in ihrer von-Neumann-Umgebung besitzen muss. Deswegen wurde in einer zweiten

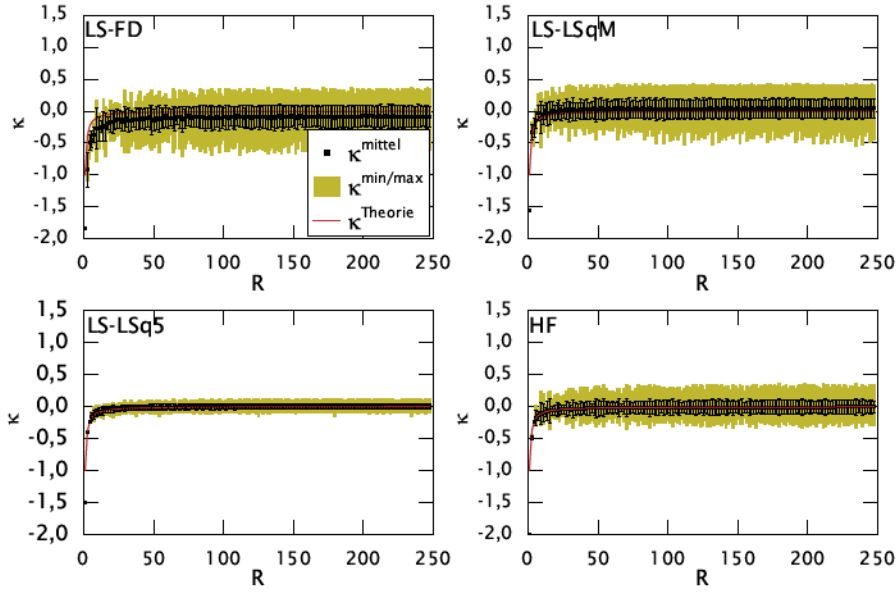


Abbildung 3.3.: Krümmung eines durch Flächenanteile repräsentierten, abgeschnittenen Kreises, berechnet durch vier verschiedene Methoden (siehe Text). Darstellung wie in Abb. 3.2.

Testreihe zunächst die f_s aus dem einbeschriebenen Kreis wie oben berechnet, danach jedoch in allen Zellen mit $0 < f_s < 1$, die keine Zelle mit $f_s = 1$ in ihrer von-Neumann-Umgebung besaßen f_s auf Null gesetzt und anhand dieses Festphasenfeldes die Krümmung berechnet. Die Ergebnisse der vier Methoden sind in Abbildung 3.3 dargestellt.

Im Gegensatz zum ersten Test fehlen in der Berechnung ein Teil jener Zellen, die dort eine starke Abweichung in der LS-FD-Berechnung verursachten. Im Ergebnis ist sowohl die Standardabweichung als auch die Streuweite geringer. Durch den insgesamt verringerten Phasenanteil wird im Mittel eine stärkere Krümmung berechnet.

In den anderen drei Methoden führt das veränderte f_s -Feld hingegen zu stärkeren Schwankungen als im obigen Test. Diese sind bei der LS-LSq5-Methode geringer als bei der HF-Methode, jedoch zeigen insbesondere die LS-LSqM-, aber auch die LS-LSq5-Methode im Mittel eine systematische Unterschätzung des Krümmungsbetrages. Die HF-Methode zeigt hingegen bei stärkerer Schwankungsbreite im Mittel immer noch eine sehr genaue Annäherung an den theoretischen Wert. Das vorliegende Modell wurde daher in zwei Varianten implementiert, einmal mit der LS-LSq5-Methode, sowie einmal mit der HF-Methode.

Bestimmung der Grenzflächennormalen

Aus beiden Methoden zur Krümmungsberechnung lässt sich jeweils eine Methode zur Berechnung der Normalenrichtung der Grenzfläche ableiten: Anhand der per kleinst-Quadrat-Anpassung angenäherten, glatten \tilde{f}_s -Funktion kann die Normalenrichtung direkt aus

$$\vec{n} = -\vec{\nabla} \tilde{f}_s \quad (3.12)$$

berechnet werden.

Um eine möglichst große Genauigkeit zu erzielen, wird der Gradient nicht in der Mitte der Zelle, sondern in einem Punkt auf der Höhenlinie $\tilde{f}_s = 0.5$ berechnet. Um diesen zu finden wird eine an die Bisektions-Methode angelehnte iterative Suche angewandt: Die Zellfläche wird sowohl in x-Richtung als auch in y-Richtung in jeweils zwei Halbfächen geteilt. Anhand des \tilde{f}_s -Gradienten in der Mitte der Fläche wird abgeschätzt, in Richtung welcher der vier Halbfächen der Schritt in Richtung $\tilde{f}_s = 0,5$ am größten ist. Daraufhin wird diese Halbzelle als neue Ausgangsfläche für die Suche verwendet. Nach 10 Schritten ist der entsprechende Punkt auf eine Teilfläche von 1/1024 Zelle genau bestimmt und die Suche wird abgebrochen. In der Mitte dieser Teilfläche wird nun die Normalenrichtung nach (3.12) bestimmt.

Vor Anwendung der HF-Methode ist hingegen schon eine rudimentäre Bestimmung der Normalenrichtung notwendig, da deren dominante Komponente benötigt wird, um die Höhenfunktion zu konstruieren. Dafür reicht eine Bestimmung nach $\vec{n} = -\vec{\nabla} f_s$ mittels FD aus. Nachdem die Höhenfunktion $y(x)$ bzw. $x(y)$ aufgestellt ist, wird die Grenzflächen-Normale als die Senkrechte zu dieser in der Zellmitte berechnet.

Behandlung nahe beieinander liegender Grenzflächen

Da in der Literatur keine Lösungsansätze zur Problemstellung der Geometrieberechnung bei Vorhandensein einer zweiten Grenzfläche zu finden sind, wurde ein eigener Algorithmus implementiert:

Zwei in Moore-Umgebung benachbarte Grenzflächenzellen (i, j) und $(i \pm 1, j \pm 1)$ können direkt als Teile desselben Grenzflächensegmentes verifiziert werden, wenn deren Grenzflächennormalen einen Winkel $< 180^\circ$ einschließen, also

$$\vec{n}^{i,j} \cdot \vec{n}^{i+k,j+l} > 0 \quad k, l \in \{-1, 0, 1\} \quad (3.13)$$

Diese Berechnung wird nicht in jedem Schritt für jedes Grenzflächenzellen-Paar durchgeführt. Wenn zwei Zellen in einem vorhergehenden Schritt schon als zusammengehörig befunden wurden, so behalten sie diesen Zustand bei. Für diesen Zweck wird die Zusammengehörigkeit in jeder Zelle für alle benachbarten Zelle in einer Matrix $s_{k,l}^{i,j}$, $k, l \in \{-1, 0, 1\}$ von Booleschen Werten gespeichert. Für nicht zusammengehörende Zellen wird in jedem Zeitschritt erneut geprüft, ob sich deren Grenzflächen vereinigt haben.

Aus dieser Implementierung folgt, dass vor der Berechnung der Normalenrichtung, die das korrigierte Festphasenfeld benötigt, schon eine Information über die Normalenrichtung vorliegt. Für diesen Zweck wird daher die Normalenrichtung aus dem vorhergehenden Zeitschritt verwendet. Neu entstandene Grenzflächenzellen besitzen noch keine berechnete Normalenrichtung und erhalten daher eine Normalenrichtung, die von den sie erzeugenden (also in ihrer Nachbarschaft festgewordenen) Grenzflächenzellen weg zeigt. Ebenso wurden die Normalen der zu Simulationsbeginn existierenden Grenzflächenzellen so initialisiert, dass sie vom Mittelpunkt ihres Keims weg zeigten.

Sowohl für die LS-LSq5-Methode als auch für die HF-Methode wird allerdings eine größere Umgebung benötigt. Zu diesem Zweck werden in einer 7×7 -Umgebung alle zusammengehörenden Zellen identifiziert. Dafür wird folgende Annahme getroffen: All jene Grenzflächenzellen in der Umgebung, zu denen innerhalb dieser Umgebung eine Verbindung über nach (3.13) paarweise benachbarte Zellen besteht, gehören zum selben Grenzflächenabschnitt wie die wie die behandelte Zelle und werden zur Geometrieberech-

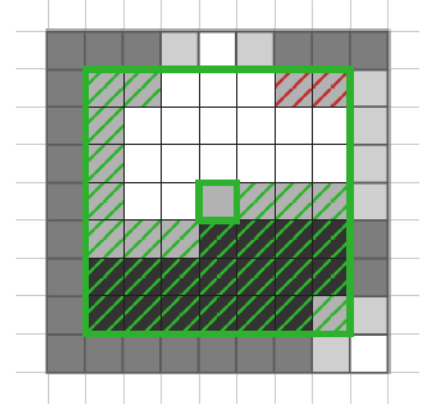


Abbildung 3.4.: In der 7×7 -Umgebung der zentralen Zelle (beides grün umrandet) werden die Festphasenanteile der grün schraffierten Zellen zur Berechnung der Geometrie herangezogen, während die rot schraffierten Zellen mit einem Festphasenanteil von null eingehen, da sie nicht innerhalb der 7×7 -Nachbarschaft mit der Zentralzelle verbunden sind.

nung herangezogen (siehe Abbildung 3.4). Dabei zählen feste Zellen untereinander sowie zu ihnen benachbarte Grenzflächenzellen immer als verbunden, während flüssige Zellen jede Verbindung unterbrechen. Zellen, die nicht zum selben Grenzflächenabschnitt gehören, gehen wie flüssige Zellen, also mit einem Festphasenanteil von null, in die Geometriebe-rechnungen ein.

3.3. Modifikationen zur Kompensation der Gitteranisotropie

3.3.1. Beeinflussung der Grenzflächenausrichtung - virtueller Festphasenanteil

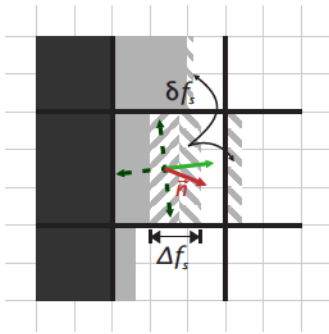


Abbildung 3.5.: Der Anteil δf_s des Zuwachses des Festphasenanteils Δf_s (beide *schraffiert*) wird in zwei benachbarte Zellen umverteilt, um die Wachstumsrichtung von der Normalen (*rot*) weg in Richtung der Vorzugsrichtung (*grün*) zu verändern. Während die obere Zelle diesen zusätzlichen Festphasenanteil sofort erhält, wird er der rechten (flüssigen) Zelle zunächst als “virtueller” Festphasenanteil zugerechnet.

Durch die Gitteranisotropie wird die Wachstumsrichtung in Richtung der Gitterrichtung verfälscht. Um dies zu kompensieren, wurde eine Modifikation des ZA-Modells entwickelt, welche die Wachstumsrichtung zurück in Richtung der physikalisch bevorzugten Wachstumsrichtung verändern soll.

Um dies zu erreichen, wird erstarrenden Grenzflächenzellen, deren Normale von der Vorzugsrichtung abweicht, ein Teil ihres in diesem Zeitschritt hinzugewonnenen Festphasenanteils abgezweigt, um die Richtung des Wachstums weg von der Gitterrichtung in Richtung der Vorzugsrichtung zu verschieben.

Die Menge des abgezweigten Festphasenanteils errechnet sich zu:

$$\delta f_s = \Delta f_s q \cdot \sin(2 \cdot [\Theta_0 - \Theta])^2 \cdot |\sin \Theta| \quad (3.14)$$

Hierbei bezeichnet $\Delta f_s = f_s^{x,y,t+1} - f_s^{x,y,t}$ den in dieser Runde stattfindenden Zuwachs an Festphase, $0 \leq q \leq 1$ einen frei wählbaren Parameter und $\Theta = \arccos \frac{n_x}{|\vec{n}|}$ den Winkel der aktuellen Grenzflächennormalen (und damit Wachstumsrichtung) zur x-Achse. Mit diesem Ansatz ist der Einfluss der Korrektur um so größer, je weiter die momentane Normalenrichtung von der bevorzugten Wachstumsrichtung abweicht und je weiter die vorgegebene Wachstumsrichtung von der Gitterrichtung abweicht.

Die Menge des umverteilten Festphasenanteils wird innerhalb der von-Neumann-Umgebung in diejenigen zwei Zellen umverteilt, die derjenigen der vier Vorzugsrichtungen am nächsten liegen, welche wiederum am nächsten an der aktuellen Grenzflächennormale liegt. Die Zelle in $\pm x$ -Richtung erhält dabei die Menge $\delta f_s \cos^2 \Theta$, die in $\pm y$ -Richtung $\delta f_s \sin^2 \Theta$. Die Geometrie des gesamten Prozesses ist in Abbildung 3.5 skizziert.

Ist eine der als Ziel der Umverteilung vorgesehenen Zellen schon fest oder gehört sie als Grenzflächenzelle zu einem anderen Grenzflächenabschnitt (s.o.), so wird der ihr zugewiesene Festphasenanteil in der erstarrenden Zelle behalten. Ist sie eine Grenzflächenzelle, die zum selben Grenzflächenabschnitt gehört, so wird ihr der entsprechende Festphasenanteil sofort gutgeschrieben. Ist die Zelle flüssig, so wird der auf diese Weise hinzugefügte Festphasenanteil gespeichert und aufsummiert. Sobald diese Zelle dann zur Grenzflächenzelle wird, wird dieser "virtuelle" Festphasenanteil sofort in realen Festphasenanteil umgewandelt, sodass diese Zelle ihre Erstarrung mit einem Festphasenanteil größer als Null beginnt. Solange die Zelle flüssig und der Festphasenanteil nur virtuell ist, wird dieser auch nicht in die Geometrieberechnungen einbezogen.

3.3.2. Isotropie durch zeitlich gemittelte Anisotropie

Ausgehend von der Arbeit von Bösch et al. [9] wurde untersucht, ob sich der Ansatz der rotierten Gitter auch auf das ZA-Modell übertragen lässt.

Übertragung des Zustandes in das rotierte Gitter

Die Übertragung des Zustandes einer Zelle in das rotierte Gitter ist die zentrale Herausforderung beim Ansatz der zeitlich gemittelten Anisotropie. Während für stetige Felder

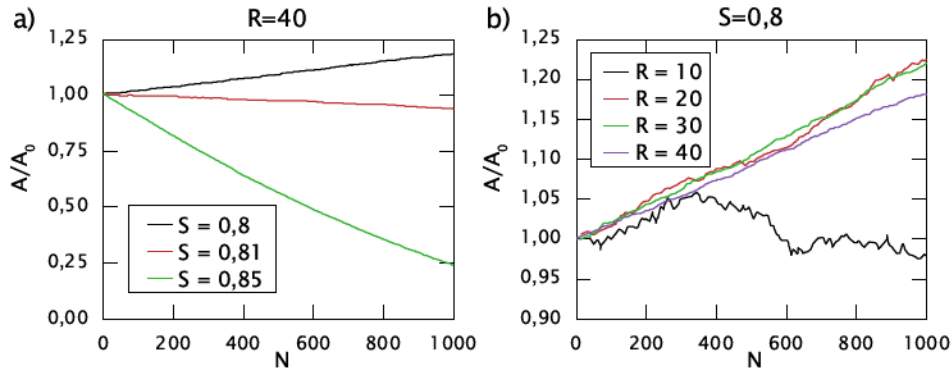


Abbildung 3.6.: a) Entwicklung des Flächeninhalts eines Kreises mit Anfangsradius 40 Zellen (bezogen auf die Ausgangsfläche) über 1000 Rotationen, mit unterschiedlichen Schwellwerten S für die Interpolation; b) Entwicklung von Kreisen unterschiedlicher Radien (in Zellen) über 1000 Rotationen bei einem Interpolationsschwellwert von 0,8.

wie das Konzentrationsfeld beliebige klassische Interpolationsmethoden angewandt werden können, stellen unstetige Felder, insbesondere der Phasenzugehörigkeit, ein Problem dar. Daher wurden die Phasenzugehörigkeiten anhand einer Interpolation des Festphasenanteils ermittelt: In [9] wurde eine Methode für die Interpolation auch stark variierender Felder wie das des Festphasenanteils entwickelt. Anhand der mit dieser Methode interpolierten Festphasenanteile wird die Phasenzugehörigkeit mittels eines Schwellwertverfahrens zugewiesen: Jede Zelle, deren interpolierter Festphasenanteil über einem Schwellwert S liegt, wird als fest angenommen. In einem weiteren Schritt werden alle Zellen, welche eine auf diese Weise als fest deklarierte Zelle in der von-Neumann-Nachbarschaft haben, zur Grenzflächenzelle deklariert und deren Festphasenanteil der Interpolation entnommen. Alle anderen Zellen werden als flüssig angenommen.

Die Konzentrationsfelder in den nun flüssigen und festen Zellen werden durch bilineare Interpolation (siehe B.1.2) bestimmt. In den Grenzflächenzellen wird danach die Geometrie neu berechnet und die Konzentrationen auf die aus dieser folgenden Gleichgewichtskonzentrationen gesetzt.

Der Wert des Schwellwertes S hat einen großen Einfluss auf die Simulation. Deshalb wurde in Vorversuchen ein sinnvoller Wert für ihn ermittelt: Ein Kreis mit Radius R wurde (wie im ersten Kreistest in 3.2.5) durch seine Flächenanteile in die Simulationsdomäne eingeschrieben und dann die Domäne wiederholt rotiert. Nach jeder Rotation wurde der Flächeninhalt des Kreises als Summe aller Festphasenanteile bestimmt und dessen zeit-

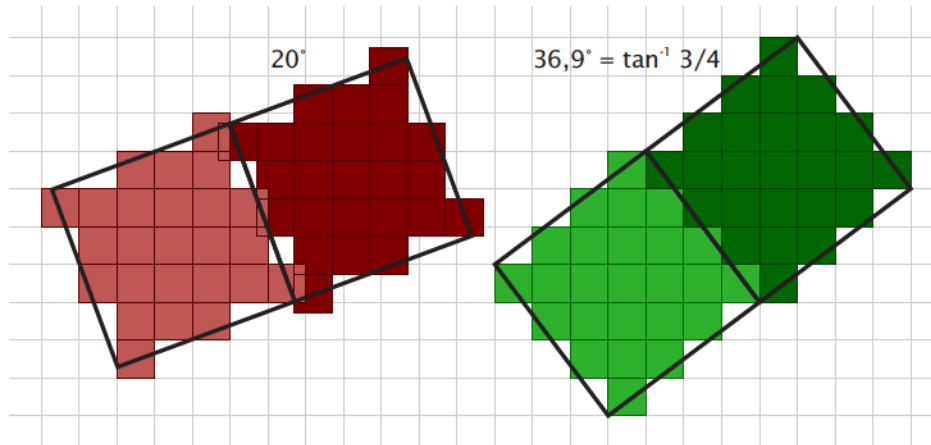


Abbildung 3.7.: Rotiertes Gitter mit einer Domänengröße von 5×5 Zellen. Bei beliebigen Winkeln (*links*) besitzen Randzellen keine wohldefinierten Nachbarn an der relativen Position $x, y \pm 1$. Bei Winkeln, welche pythagoräischen Tripeln (*rechts*: $(5,4,3)$) entsprechen, besitzen sie diese.

liche Entwicklung untersucht. Der Einfluss unterschiedlicher Schwellwerte S ist in Abbildung 3.6a gezeigt. Je nach gewähltem Schwellwert ergibt sich über den Verlauf von 1000 Drehungen ein Abfall oder ein Anstieg der Kreisfläche. Der Übergang von Schrumpfung zu Wachstum durch Rotation befindet sich in der Nähe von $S = 0,8$. In Abbildung 3.6b ist der Einfluss des Radius bei einem Schwellwertes von $S = 0,8$ gezeigt. Während Kreise mit Radius $R \geq 20$ Zellen ein gleichmäßiges, schwaches Wachstum unter der Rotation erfahren, behält ein Kreis mit geringem Radius $R = 10$ seine Fläche ungefähr bei ($\pm 10\%$). Da das Verhalten der Dendritenspitzen, welche geringe Krümmungsradien aufweisen, maßgeblich das Wachstumsverhalten eines Dendriten bestimmt, wurde daher der Wert $S = 0,8$ für weitere Simulationen gewählt, da kleine Radien damit gut reproduziert werden können.

Randbedingungen und Gittergröße

Eine weitere Problemstellung bei rotierenden Gittern ist die Implementierung von Randbedingungen. Die Kante der gedrehten Simulationsdomäne ist nicht gerade und damit linear wie im ungedrehten Zustand, sondern weist eine gestufte Geometrie auf. Die Randzellen sind anteilsweise Teil der Domäne und Teil der Randes bzw. der Randbedingungen. In der Literatur ist keine Methode bekannt, Randbedingungen unter diesen Umständen zu implementieren. Die einzig sinnvolle Möglichkeit, welche auch in [9] gewählt wurde, sind periodische Randbedingungen. Bei allgemeinen Drehwinkeln tritt aber der Effekt auf,

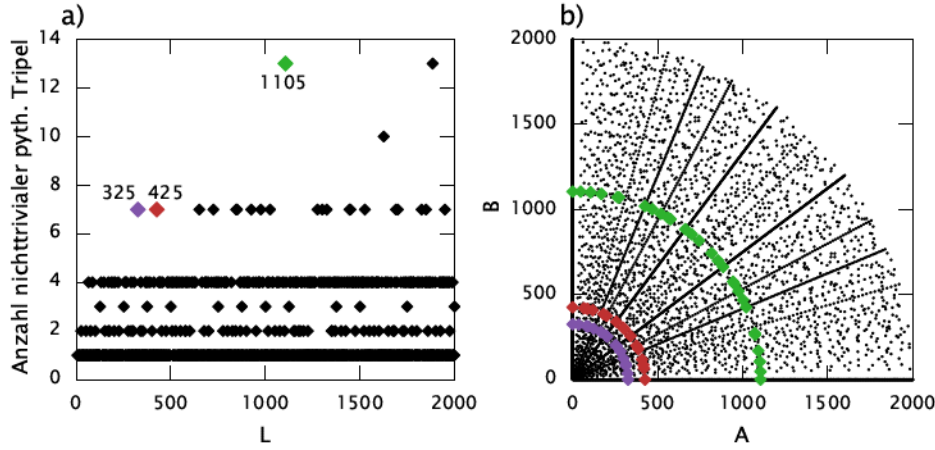


Abbildung 3.8.: a) Anzahl der möglichen nichttrivialen pythagoräischen Tripel $A^2 + B^2 = L^2$ für verschiedene Domänengrößen L ; b) Veranschaulichung aller möglichen pythagoräischen Tripel bis $L = 2000$ und damit auch der möglichen Rotationswinkel. Die Punkte für die Domänengrößen $L = 325$, 425 und 1105 sind beispielhaft farbig hervorgehoben.

dass auf einer der für Diffusionsberechnungen mittels FD vorausgesetzten Position $x, y \pm 1$ nicht mehr der Mittelpunkt einer Zelle liegt (Abbildung 3.7, links). In [9] wurden daher die fehlenden Werte an diesen Positionen interpoliert, d.h. es waren zusätzlich zur Interpolationsberechnung während des Rotationsschrittes auch Interpolationen während der eigentlichen Simulation nötig. Um dies zu umgehen wurde in dieser Arbeit ein anderer Ansatz gewählt: Die Größe der Simulationsdomäne sowie die gewählten Drehwinkel wurden so gewählt, dass auf der “richtigen” Position für FD immer der Mittelpunkt einer Zelle zu liegen kommt. Dies wurde folgendermaßen sichergestellt:

Das Kriterium der richtigen Position ist genau dann erfüllt, wenn sich die Positionen aller vier Ecken der quadratischen Simulationsdomäne innerhalb ihrer respektiven Zellen an derselben Position befinden. Dann entstehen beim zellenweisen Aneinanderlegen der Simulationsdomäne weder Überlappungen noch Lücken. Damit sich die Ecken innerhalb ihrer Zellen an derselben Position befinden können, müssen sich diese Zellen exakt im Abstand der Breite des Simulationsraumes $L \in \mathbb{N}$ befinden. Gleichzeitig besitzen sie im Simulationsraum den Abstand (A, B) , $A, B \in \mathbb{Z}$. Daher sind die möglichen Rotationswinkel $\alpha = \arctan(\frac{A}{B})$ durch die möglichen pythagoräischen Tripel mit $A^2 + B^2 = L^2$ und damit durch die gewählte Domänengröße L beschränkt (Abbildung 3.7, rechts). Aufgrund der vierzähligen Symmetrie des Simulationsraumes und des simulierten Problems existieren bei n nichttrivialen Pythagoräischen Tripeln $2n+1$ voneinander unterschiedliche Rotations-

winkel. Bei Gittergrößen bis 2000 Zellen Seitenlänge besitzt die überwältigende Mehrzahl vier oder weniger nichttriviale pythagoräische Tripel. Domänengrößen mit sieben nichttrivialen Tripeln und damit 15 möglichen Winkeln treten zuerst mit Domänengrößen von 325 und 425 auf. 13 nichttriviale Tripel und damit 27 mögliche Drehwinkel existieren zuerst bei einer Domänengröße von 1105 (Abbildung 3.8a). Die möglichen Winkel sind hinreichend gleichmäßig verteilt, es existieren weder signifikante Lücken noch Häufungen (Abbildung 3.8b).

Zeitskalen für die Gitterrotation

Die Zeitskala der Rotation, und damit das Intervall zwischen zwei Rotationsschritten, spielt eine wichtige Rolle beim Effekt der Rotation. Daher wurden unterschiedliche, konstante Rotationsintervalle gewählt, um diesen Einfluss zu untersuchen. Da jedoch bei einer konstanten Abkühlrate eine Beschleunigung der Dendritenspitze zu erwarten ist, wurde auch ein veränderliches Rotationsintervall implementiert. Dafür wurde an einer nicht rotierenden Dendritensimulation der Erstarrungszeitraum der jeweiligen Zelle an der Dendritenspitze untersucht. Anhand dieser Kurve (siehe unten, Abbildung 3.13) wurde eine lineare Funktion für das Erstarrungsintervall festgelegt. Um die Stabilität der Simulation bei langen Simulationszeiten zu gewährleisten, wurde zusätzlich ein minimales Drehintervall erzwungen. Die resultierende Funktion $I(N)$ hatte daher die Form:

$$I(N) = \min(I_0 - m_I N, I_m) \quad (3.15)$$

In jedem Zeitschritt wird das gegenwärtige Drehintervall berechnet. Überschreitet die Anzahl der Zeitschritte seit der letzten Rotation dessen Größe, so wird das Gitter rotiert.

Weitere Ansätze, wie die tatsächliche Verfolgung der Spitzenzelle mit Einleitung eines Rotationsschrittes nach ihrer vollständigen Erstarrung, oder Rotation bei Überschreiten eines gewissen Zuwachses an globalem Festphasenanteil, wurden zwar untersucht, führten jedoch nicht zu qualitativ besseren Ergebnissen als die hier vorgestellten Varianten und werden daher im Rahmen dieser Arbeit nicht weiter erörtert.

3.4. Simulation dendritischer Erstarrung

3.4.1. Modellmaterial und -parameter

Als Modellsystem wurde Aluminium-Kupfer mit einem linearisierten Phasendiagramm gewählt [88]. Der Anstieg der Liquiduslinie beträgt $m = -5,8\text{K/At\%}$, der Verteilungskoeffizient ist $k = 0,128$. Die Diffusionskoeffizienten von Kupfer in Aluminium betragen $D_l = 3,4 \cdot 10^{-9}\text{m}^2/\text{s}$ und $D_s = 3,4 \cdot 10^{-13}\text{m}^2/\text{s}$ in der flüssigen bzw. festen Phase. Der Gibbs-Thomson-Koeffizient beträgt $\gamma_0 = 2,48 \cdot 10^{-7}\text{Km}$, der Anisotropieparameter der Grenzflächenspannung zwischen Fest- und Flüssigphase wurde auf 0,01 festgelegt.

Alle Simulationsräume waren 500×500 Zellen, im Falle der rotierten Simulationen 425×425 Zellen groß, mit einer Gitterkonstante von $0,5\mu\text{m}$. Die Randbedingungen waren in allen Simulationen periodisch.

Sofern nicht anders angegeben wurden alle simulierten Systeme einer konstanten Abkühlrate von 50K/min ausgesetzt. Die Ausgangskonzentration an Kupfer betrug $1,7382\text{At\%}$ (entsprechend $4,0\text{Gew\%}$). Die Ausgangstemperatur wurde so gewählt, dass ein kreisförmiger Keim mit dem Radius eines halben Simulationsgitterabstandes gerade stabil war. Der Startkeim bestand aus einer quadratischen Anordnung von vier festen Zellen. Bei Simulationen auf rotierendem Gitter lag die bevorzugte Wachstumsrichtung des Startkeims bis zur ersten Rotation in Gitterrichtung.

3.4.2. Einfluss von Krümmungsberechnung und Anisotropiekorrektur

In Abbildung 3.9 sind die Wachstumsverläufe von Dendriten, welche mit unterschiedlichen Krümmungsberechnungen sowie mit und ohne Anisotropiekorrektur berechnet wurden, dargestellt. Die dabei dem initialen Keim als bevorzugte Wachstumsrichtung vorgegebene Richtung mit einem Winkel von 20° zu den Gitterachsen ist ebenso eingezeichnet.

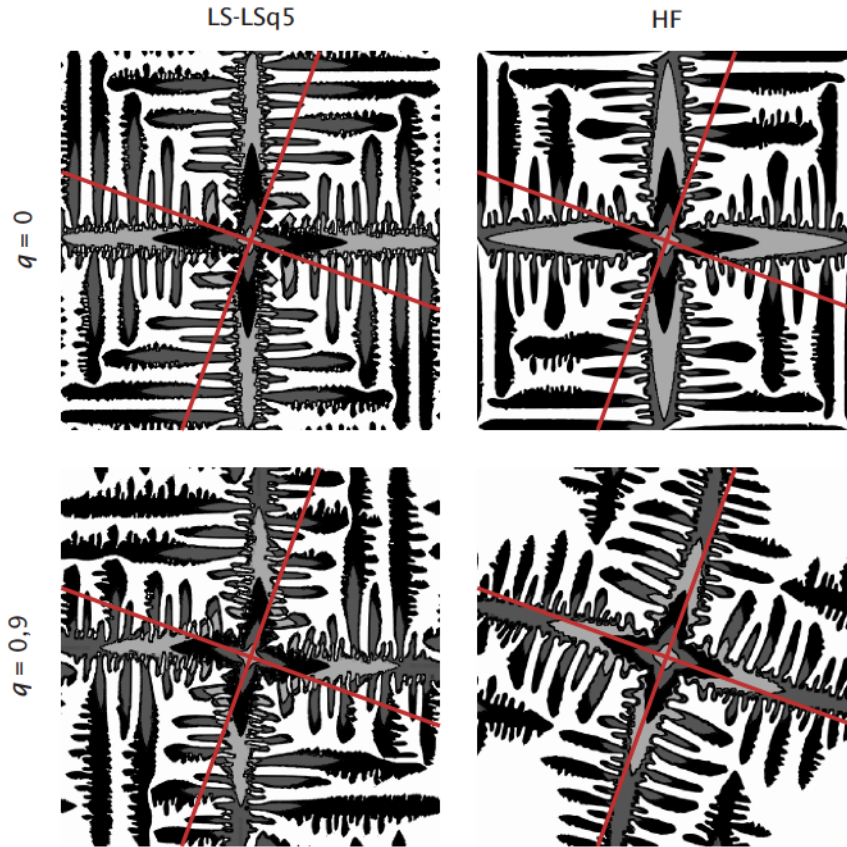


Abbildung 3.9.: Wachstumsverlauf simulierter Dendriten mit einer vorgegebenen Wachstumsrichtung in 20° zum Simulationsgitter (*rote Linien*) mit unterschiedlichen Varianten des Modells. Die übereinander dargestellten Zustände mit unterschiedlichen Graustufen haben einen zeitlichen Abstand von jeweils 50ms zueinander. Krümmungsberechnung durch LS-LSq5-Methode (*linke Spalte*) oder durch HF-Methode (*rechte Spalte*). *Obere Reihe* ohne Anisotropiekorrektur, *untere Reihe* mit Korrekturparameter $q = 0,9$.

Einfluss der Krümmungsberechnung

Obwohl beide untersuchten Methoden zur Krümmungsberechnung im abgeschnittenen Kreistest (Abschnitt 3.2.5) eine vergleichbare Qualität aufwiesen, führen sie doch zu signifikanten Unterschieden in den simulierten Dendriten. So führt die LS-LSq5-Methode im Vergleich zur HF-Methode zu schlankeren Primär- und Sekundärarmen. Ebenso zeigt die LS-LSq5-Methode bei mittleren und späten Stadien eine höhere Wachstumsgeschwindigkeit sowie eine verstärkte Bildung von Sekundärarmen. Diese größere Dichte an Sekundärarmen wächst sich jedoch relativ schnell aus, sodass der mittlere Sekundärarmabstand (weit entwickelter Sekundärarme) bei beiden Methoden zum Ende hin wieder eine ver-

gleichbare Größenordnung annimmt.

Einfluss der Anisotropiekorrektur

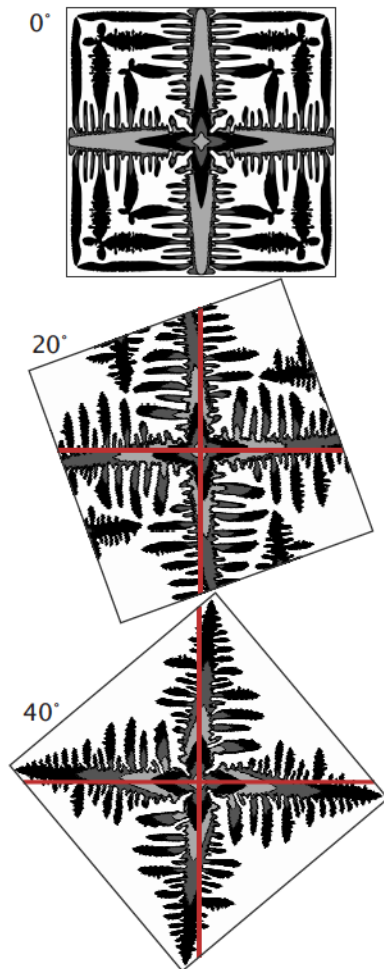


Abbildung 3.10.: Simulierte Dendriten mit HF-Methode und Anisotropiekorrektur ($q = 0,9$) und unterschiedlichen bevorzugten Wachstumsrichtungen. Zeitlicher Abstand zwischen zwei Zuständen 50ms. Zur besseren Vergleichbarkeit wurde der 20°- und der 40°-Dendrit so dargestellt, dass die bevorzugte Wachstumsrichtung horizontal bzw. vertikal liegt.

Werden die Dendriten ohne Anisotropiekorrektur simuliert, so ist der starke Einfluss des unterliegenden Simulationsgitters erkennbar. Lediglich das initiale Wachstum des Keims weist eine geringe Ausrichtung in Richtung der bevorzugten Wachstumsrichtung auf, die sich in einem schwach asymmetrischen Dendriten im Frühstadium des Wachstums äußert. Danach wachsen alle Dendritenarme im Wesentlichen in Gitterrichtung, lediglich das Wachstum der Sekundärarme variiert links und rechts der Primärarme: Auf der Seite der bevorzugten Wachstumsrichtung kann ein leicht bevorzugtes Wachstum der Sekundärarme im Vergleich zur anderen Seite beobachtet werden. In den konkreten Beispielen sind die Sekundärarme rechts der Primärarme etwas länger.

Wird die Anisotropiekorrektur hingegen aktiviert, so zeigt sich ein deutlich sichtbarer Effekt auf die Simulation des Wachstums der Dendriten. Insbesondere im Frühstadium des Wachstums ist eine deutliche Ausrichtung des Dendriten in Richtung der bevorzugten Wachstumsrichtung beobachtbar. In der Simulation mit der LS-LSq5-Krümmungsberechnung wächst sich dieser Effekt jedoch wieder aus und das Dendritenwachstum richtet sich schon nach kurzer Zeit wieder in Gitterrichtung aus, und auch alle Sekundär- und Tertiärarme wachsen in Gitterrichtung. In der Simulation mit der

HF-Methode ist der Effekt der Anisotropiekorrektur hingegen wesentlich stärker. Der Den-

drit wächst im Vergleich zur LS-LSq5-Simulation sehr lange in die vorgegebene Richtung und weicht erst spät in Richtung Gitterrichtung davon ab. Ebenso wachsen alle Sekundär- und Tertiärarme in die vorgegebene Wachstumsrichtung. Dennoch wachsen die Sekundärarme nicht gleichmäßig aus den Primärarmen, sondern es ist eine Bevorzugung diesmal der linken Seite der Primärarme zu erkennen. Während diese Ungleichmäßigkeit bei der LS-LSq5-Simulation insbesondere in den späteren Stadien der Erstarrung stark zum Tragen kommt, ist sie in der HF-Simulation im Wesentlichen zu Beginn zu beobachten, während die später wachsenden Sekundärarme gleichmäßiger aus den Primärarmen erwachsen.

3.4.3. Einfluss der Wachstumsrichtung

In Abbildung 3.10 sind Wachstumsstadien mit Höhenfunktion und Anisotropiekorrektur simulierter Dendriten mit bevorzugten Wachstumsrichtungen mit einem Winkel von 0° , 20° und 40° zur Gitterrichtung dargestellt. Zunächst ist zu sehen, dass auch eine bevorzugte Wachstumsrichtung von 40° näherungsweise eingehalten wird. Gleichzeitig beeinflusst die Wachstumsrichtung das Wachstumsverhalten des Dendriten an mehreren Stellen: Je näher die bevorzugte Wachstumsrichtung an der Gitterrichtung anliegt, desto schneller wächst der entstehende Dendrit. Gleichzeitig ist der Primärarm dabei spitzer und schmaler.

Ebenso hängt das initiale Wachstumsverhalten der Sekundärarme vom Wachstumswinkel ab. Bei 0° treten zunächst sehr dichte kleine Fluktuationen auf beiden Seiten der Primärarme auf, welche in sehr vielen kleinen Sekundärarmen resultieren, die sich danach wiederum durch Wachstumsauslese ausdünnen. Bei 20° treten solche geringen Fluktuationen auf der rechten Seite stärker auf als auf der linken Seite, was eine größere initiale Dichte an Sekundärarmen auf dieser Seite zur Folge hat. Bei 40° tritt dieser Effekt an beiden Seiten mit nahezu gleicher Frequenz auf, wobei die Fluktuationsamplitude auf der rechten Seite der Primärarme größer ist. In späten Stadien sind die Sekundärarme, abgesehen von der unterschiedlichen Wachstumsgeschwindigkeit, in Ausprägtheit und Dichte wieder vergleichbar.

3.4.4. Dendritensimulation mit Gitterrotation

Konstantes Rotationsintervall

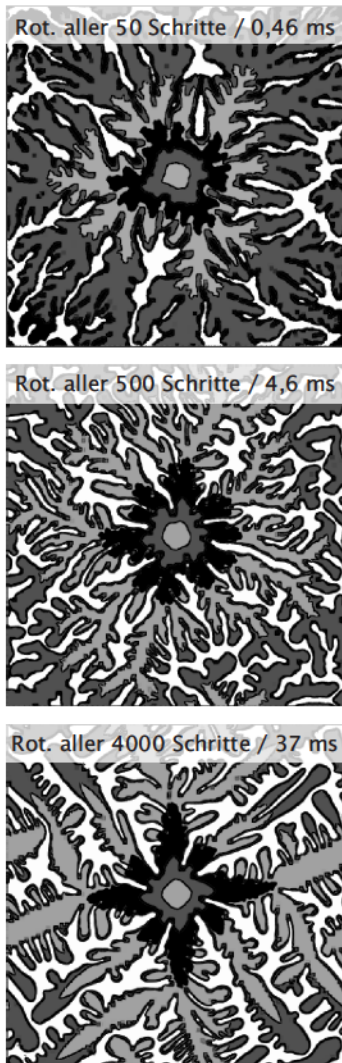


Abbildung 3.11.: Dendritensimulation mit Rotation des Simulationsgitters in unterschiedlichen regelmäßigen Intervallen, bevorzugte Wachstumsrichtung jeweils horizontal und vertikal. Abstand der einzelnen abgebildeten Zustände 50ms.

Für das Modell mit rotierendem Gitter wurde aufgrund der Ergebnisse im vorherigen Abschnitt die HF-Methode zur Krümmungsberechnung eingesetzt. Danach wurde der Einfluss der Länge eines konstanten Rotationsintervalls auf das Ergebnis untersucht. Dafür wurde das Rotationsintervall über zwei Größenordnungen von 20 Zeitschritten (0,18ms) bis 4000 Zeitschritte (37ms) variiert.

In Abbildung 3.11 sind repräsentative Ergebnisse dieser Simulationsreihe dargestellt. Für alle gewählten Rotationsintervalle ist eine sehr schwache Einhaltung der vorgegebenen Wachstumsrichtung zu erkennen, ebenso eine starke Neigung zur Aufspaltung der Dendritenspitzen mit Bildung von Primärarmen in der eigentlich benachteiligten 45°-Richtung. Bei kurzen Drehintervallen sind diese Effekte etwas ausgeprägter und die simulierten Strukturen ähneln "Seaweed"-Strukturen, wie sie bei der Erstarrung von Materialien mit isotroper Fest-Flüssig-Grenzflächenenergie auftreten. Gleichzeitig ist mit längeren Drehintervallen eine Zunahme der Wachstumsgeschwindigkeit festzustellen.

Bei kurzen Drehintervallen ist tatsächlich kein Gittereinfluss mehr festzustellen, während sich bei sehr langen Drehintervallen die Orientierung des Gitters wieder im simulierten Dendrit niederschlägt (Abbildung 3.11, unten).

Überhöhte Grenzflächenenergieanisotropie

In einer zweiten Simulationsreihe wurde die Grenzflächenenergieanisotropie auf einen überhöhten Wert von $\epsilon = 0,06$ gesetzt. In Abbildung 3.12 sind

repräsentative Ergebnisse dieser Simulationsreihe abgebildet. Deutlich zu sehen ist der Effekt der Grenzflächenenergieanisotropie auf die Wachstumsgeschwindigkeit der Dendriten. Diese ist signifikant höher als bei $\epsilon = 0,01$. Gleichzeitig ist bei den Simulationen mit Rotationsintervallen zwischen 50 und 1000 Zeitschritten eine sehr gute Einhaltung der bevorzugten Wachstumsrichtung über lange Simulationszeiten zu beobachten. Wieder ist zu beobachten, dass die generelle Wachstumsgeschwindigkeit der Dendriten mit der Länge des Rotationsintervalls zunimmt. Ein Zusammenbruch der Ausrichtung des Wachstums nach der vorgegebenen Richtung ist lediglich bei sehr kurzen oder sehr langen Rotationsintervallen sowie bei späten Simulationszuständen zu beobachten. Bei sehr kurzen Rotationsintervallen tritt wie bereits oben Spitzenaufspaltung und isotropes Wachstum auf, während bei sehr langen Intervallen wieder der Einfluss der Gitterrichtung Überhand nimmt.

Variables Rotationsintervall

Der Einfluss einer veränderlichen Rotationsfrequenz wurde ebenfalls untersucht. Bei (physikalisch korrekter) niedriger Grenzflächenenergieanisotropie unterschieden sich die Simulationsergebnisse nicht wesentlich von denen bei konstanten Rotationsintervallen (nicht dargestellt). Das Ergebnis bei überhöhter Grenzflächenenergieanisotropie (wie oben) ist in Abbildung 3.13 abgebildet. Dabei ist links der Verlauf der Erstarrungszeit der Spitzenzelle über den Verlauf der Simulation abgetragen. Daraus wurden die Parameter für das veränderliche Drehintervall $I(N)$ so festgelegt, dass dieses Intervall immer oberhalb der gemessenen Erstarrungskurve verläuft: $I_0 = 300$, $m_I = 0,015$ und $I_m = 100$.

Der resultierende Dendrit ist in Abbildung 3.13 rechts abgebildet. Die Wachstumsgeschwindigkeit bewegt sich im Bereich der Ergebnisse mit Rotationsintervallen zwischen 500 und 50 Schritten. Gegenüber diesen Dendriten tritt Spitzenaufspaltung in etwas geringerem Maße auf, und insbesondere später wachsende Sekundärarme zeigen ein besseres Einhalten der vorgegebenen Wachstumsrichtung. Einzelne Sekundärarme nahe des Ursprungskeims und insbesondere Tertiärarme wachsen hingegen außerhalb der Wachstumsrichtung. Dieser Effekt ist dennoch weniger ausgeprägt als bei konstanter Rotationsfrequenz.

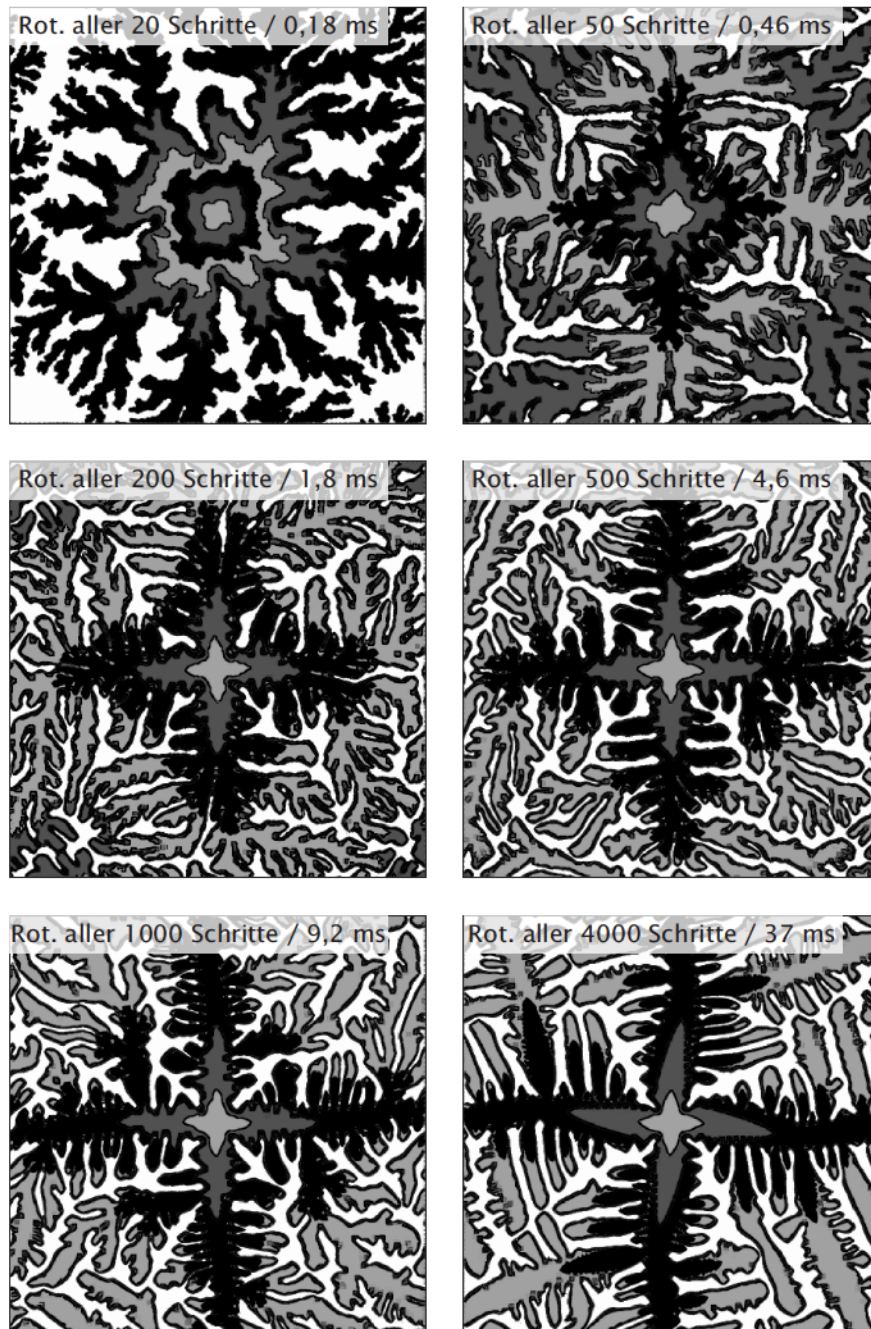


Abbildung 3.12.: Dendritensimulation mit Rotation des Simulationsgitters in unterschiedlichen regelmäßigen Intervallen und überhöhter Grenzflächenenergieanisotropie von $\varepsilon = 0,06$. Bevorzugte Wachstumsrichtung horizontal/vertikal, zeitlicher Abstand der abgebildeten Zustände 50ms.

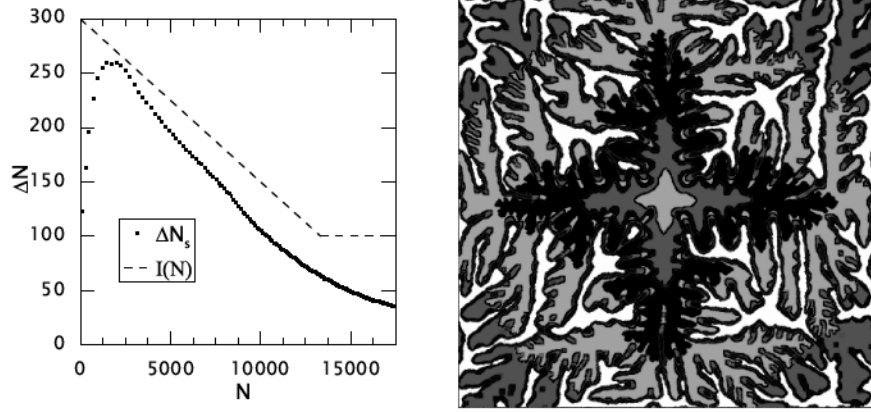


Abbildung 3.13.: *Links:* Erstarrungsdauer ΔN_s (in Schritten) der Zelle an der Dendritenspitze und Verlauf des Rotationsintervalls $I(N)$ über der Anzahl Simulationsschritte N . *Rechts:* Resultierender Dendrit, Zustände im Abstand von 50ms.

3.4.5. Quantitative Analyse: Wachstum in unterkühlter Schmelze

Um die Qualität des ZA-Modells quantitativ zu untersuchen, wurde das Wachstum eines Dendriten in einer Schmelze konstanter Unterkühlung simuliert. Für diesen Fall existiert mit dem LGK-Modell [21] eine analytische Beschreibung des stationären Zustandes, welche unter Annahme einer parabolischen Dendritenspitze unter Anderem deren Wachstumsgeschwindigkeit vorhersagt.

Da die Erstarrung im vorliegenden Modell über eine Massenbilanz berechnet wird, liegt die Grenzflächengeschwindigkeit selbst im Modell nicht vor. Zur Auswertung der Dendritengeschwindigkeit musste daher eine Länge des Primärarmes definiert werden. Dafür wurde diejenige Grenzflächenzelle (i^s, j^s) als Zelle der Dendritenspitze angenommen, welche die geringste x -Position inne hat. In Abhängigkeit ihres Festphasenanteils wurde dann die Länge des Primärarmes als

$$l = \left| \vec{x}^{i^s, j^s} - \vec{x}^c \right| + \frac{f_s^{i^s, j^s}}{\cos \Theta} \quad (3.16)$$

berechnet. Dabei ist $0 < \Theta < 45^\circ$ der Winkel des Primärarmes (mit dem Zentrum des

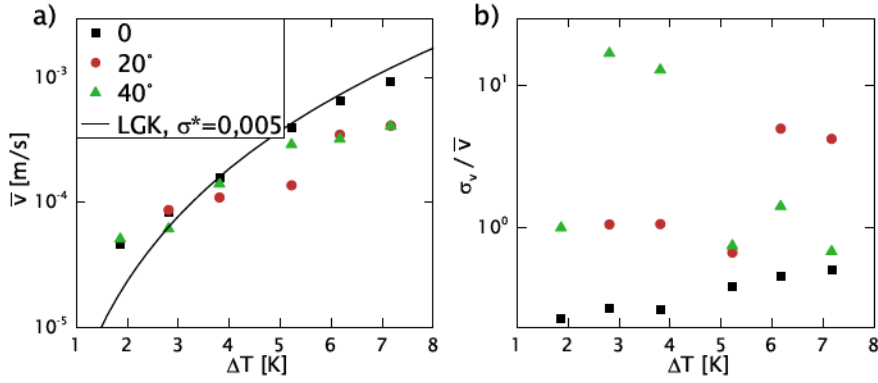


Abbildung 3.14.: Simulierte Dendritenspitzen­geschwindigkeit bei verschiedenen Unterkühlungen ΔT ; a) Mittlere Geschwindigkeit \bar{v} für Simulationen mit verschiedenen Wachstumsrichtungen im Bezug zur Gitterrichtung, im Vergleich mit dem analytischen Modell [21] mit $\sigma^* = 0,005$; b) Stärke der Standardabweichung σ_v in Relation zu den Mittelwerten (Symbole wie a)).

Simulationsraumes \vec{x}^c :

$$\cos \Theta = \frac{\vec{x}^{ts,j^s} - \vec{x}^c}{|\vec{x}^{ts,j^s} - \vec{x}^c|} \quad (3.17)$$

Der Abstand setzt sich also zusammen aus dem Abstand der Zelle zum Zentrum des Simulationsraumes (der Ort des Keims) sowie aus ihrem Festphasenanteil. Wenn die Grenzfläche die Zelle vollständig durchquert, also der Festphasenanteil eins erreicht, dann wird angenommen, dass die Grenzfläche eine Strecke von $\frac{1}{\cos \Theta}$ zurückgelegt hat. Die Grenzflächengeschwindigkeit wurde aus den bestimmten Primärarmlängen nach $v = \frac{dl}{dt}$ mittels finiter Differenzen zweiter Ordnung berechnet.

Da deutliche Fluktuationen der Spitzen­geschwindigkeit auftraten, wurde anhand der $v - t$ -Kurve ein Bereich ausgewählt, in dem die Geschwindigkeit im Mittel konstant war, und in diesem Bereich die mittlere Geschwindigkeit sowie deren Standardabweichung berechnet. Die Ergebnisse sind in Abbildung 3.14 aufbereitet.

Zum Vergleich mit der analytischen Lösung wird noch der Wert des Stabilitätsparameters σ^* benötigt, welcher für zwei Dimensionen unbekannt ist. In [88] wurde er für eine zweidimensionale Dendritensimulation mittels der Phasenfeldmethode zu 0,169 bestimmt. Bei der Überprüfung dieser Arbeit ergab sich jedoch, dass die dort veröffentlichte analytische Kurve sowie die erzielten Ergebnisse (bei denselben physikalischen Parametern wie die dieser Arbeit) eher einem Wert von $\sigma^* = 0,005$ entspricht .

Setzt man diesen Wert ein, so zeigt sich, dass die mit ZA in Gitterrichtung simulier-

ten mittleren Dendritengeschwindigkeiten dem analytischen Modell mit leichten Abweichungen folgt (Abbildung 3.14a). Bei Wachstum in von der Gitterrichtung verschiedenen Richtungen zeigen sich stärkere Abweichungen.

Die geringere Genauigkeit der Ergebnisse bei abweichenden Wachstumsrichtungen zeigt sich auch bei der Schwankungsbreite der Wachstumsgeschwindigkeiten (Abbildung 3.14b). Bei fast allen Simulationen abseits der Gitterrichtung ist die Standardabweichung der berechneten Geschwindigkeiten größer als die mittlere Geschwindigkeit selbst, während bei den Simulationen in Gitterrichtung die Standardabweichung ungefähr eine halbe Größenordnung unter ihr liegt. Dies zeigt sich auch in den Medianen (nicht abgebildet), die bei den 0° -Simulationen nahe bei den Mittelwerten liegen, während sie bei den anderen Simulationen um zehn bis fünfzig Prozent von jenen abweichen.

3.4.6. Machbarkeitsuntersuchung: Simulation in 3D

Das ZA-Modell wurde als Machbarkeitsstudie auch auf drei Dimensionen erweitert. Da damit eine enorme Erhöhung der Rechenzeit einhergeht, wurde eine vereinfachte Variante des Modells gewählt, in welcher zur Krümmungsberechnung die LS-LSqM-Methode (Kleinste-Quadrate-Anpassung in der Moore-Umgebung) eingesetzt wurde. Daher musste auch lediglich die Moore-Umgebung auf nahe beieinanderliegende Grenzflächen überprüft werden.

Des Weiteren konnte die Simulation weder vom Speicherverbrauch noch vom Rechenaufwand nicht mehr sinnvoll auf einem einzelnen PC durchgeführt werden. Stattdessen wurde die Simulation mit der MPI-Bibliothek (Message Parsing Interface) “libgeodecomp” [89] verbunden, welche es erlaubt, auf Rechnerverbünden zu simulieren. Ein auf diese Weise simulierter Dendrit (Parameter wie die 2D-Simulationen) ist in Abbildung 3.15 gezeigt.



Abbildung 3.15.: Ergebnis einer dreidimensionalen Simulation

3.5. Diskussion

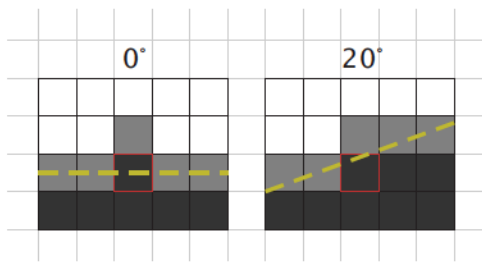


Abbildung 3.16.: Geometrischer Effekt einer durch Fluktuation vorzeitig erstarrten Zelle (rot) in Grenzflächen unterschiedlicher Orientierung (gelb).

Die implementierte Anisotropiekorrektur durch virtuelle Festphasenanteile zeigt eine sehr unterschiedliche Effektivität, abhängig von der gewählten Methode zur Krümmungsberechnung. Dabei sind die Ursachen, die die Methode bei der Level-Set-Methode scheitern lässt, schon bei den Simulationen ohne Anisotropiekorrektur zu sehen: Die Primärarme weisen bei der Level-Set-Variante eine wesentlich stärkere Rauheit auf. Diese Rauheit

resultiert in einer früheren Entstehung von Sekundärarmen, und dies auch zunächst in größerer Zahl als bei der Simulation mit Höhenfunktion. Aufgrund ihres früheren Auftretens ist auch die Anreicherung von Legierungsatomen um den Primärarm herum bei ihrer Entstehung weniger ausgeprägt, was zu der beobachteten größeren Wachstumsgeschwindigkeit der Sekundärarme führt. Gleichzeitig wird dadurch das Breitenwachstum des Primärarmes gebremst, was seine geringere Dicke zur Folge hat.

Diese Fluktuationen der Seitenfläche der Primärarme tritt bei dem Level-Set-Modell mit Anisotropiekorrektur in selben Maße auf. Dabei zeigt sich, dass diese Fluktuation das Wachstum in Gitterrichtung befördert, und zwar in einem stärkeren Maße als durch die Anisotropiekorrektur kompensiert werden kann. Entlang einer Grenzfläche, die ungefähr in Gitterrichtung liegt, kann eine einzelne vorzeitig erstarrte Zelle später einen Sekundärarm bilden, während eine einzelne Zelle in einer schrägen Grenzfläche einen geringeren geometrischen Effekt zeigt (siehe Abbildung 3.16).

Die Anisotropiekorrektur wird zusätzlich dadurch geschwächt, dass der Dendrit mit der Level-Set-Methode eine stärkere Krümmung an den Spitzen bzw. dünnere Primär- und Sekundärarme besitzt, da die Anisotropiekorrektur eine geringere Fläche besitzt, auf die sie wirken kann. Insgesamt muss festgestellt werden, dass der Level-Set-Ansatz selbst in seiner geglätteten Form (angepasste Funktion über 21 Zellen) für eine Simulation dendritischer Erstarrung nicht geeignet ist, sondern die Höhenfunktionsmethode vorzuziehen ist. Dennoch kann konstatiert werden, dass das Sekundärarmwachstum im Vergleich mit der

Literatur (Abbildung 2.5) schon wesentlich gleichmäßiger erfolgt.

Ebenso kann bei allen durchgeführten Simulationen beobachtet werden, dass sonstige physikalische Effekte wie “soft impingement”, Tertiärarmbildung und Wachstumsauslese der Sekundärarme korrekt abgebildet werden. Lediglich bei einem 0° -Dendriten (mit Höhenfunktionsmethode) ist ein Zusammenwachsen je zweier Sekundärarme zu beobachten, was mit der enormen Wachstumsgeschwindigkeit der Sekundärarme in diesem Bereich zusammenhängt. Noch bevor das Wachstum durch die überlappenden Konzentrationsfelder gestoppt ist, sind die Arme schon über Eck verbunden, indem die verbindende Zelle aufgrund der Symmetrie von beiden sekundären Spitzen gleichzeitig als Grenzflächenzelle aktiviert wird.

Selbst mit der Höhenfunktionsmethode und Anisotropiekorrektur zeigt sich jedoch ein signifikanter Einfluss der vorgegebenen Wachstumsrichtung des Dendriten auf sein Wachstumsverhalten.

Je weiter diese von der Gitterrichtung abweicht, desto langsamer wird das Primärarmwachstum. Dies kann mit der unterschiedlichen Form der Dendritenspitze erklärt werden, die mit zuneh-

mender Abweichung der Wachstumsrichtung von der Gitterrichtung eine immer stumpfere Form annimmt (siehe Abbildung 3.17). Diese Form bedingt jedoch gleichzeitig ein langsames Wachstum, da die Spitze entsprechend eine geringere spezifische Oberfläche hat und dadurch ihre Kopplung an das umgebende Konzentrationsfeld schwächer ist.

Ebenfalls wird die vorgegebene Wachstumsrichtung nicht exakt eingehalten. Stattdessen zeigt sich eine Annäherung des Wachstums in Richtung der näher liegenden speziellen Gitterrichtung. Bei einer vorgegebenen Vorzugsrichtung von 20° zum Gitter wirkt die Abweichung in Richtung der $\langle 10 \rangle$ -Richtungen des Gitters, während sie bei der 40° -Simulation in Richtung der $\langle 11 \rangle$ -Richtungen tendiert.

Das Sekundärarmwachstum ist bei diesen Simulationen mit Höhenfunktion und Anisotropiekorrektur immer an derjenigen Seite bevorzugt, die der tatsächlichen Vorzugsrichtung abgewandt ist. Dies rührt daher, dass die dazugehörige Flanke des Primärarmes

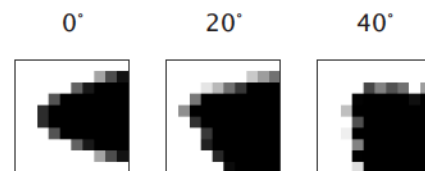


Abbildung 3.17.: Detail aus Abbildung 3.10: Dendritenspitzen bei unterschiedlicher vorgegebener Wachstumsrichtung nach einer Wachstumszeit von 150ms.

parallel zur bevorzugten Wachstumsrichtung liegt und damit optimale Wachstumsbedingungen besitzt, während die gegenüberliegende Flanke einen gewissen Winkel zur bevorzugten Wachstumsrichtung einnimmt, die das Wachstum dort im Vergleich hemmt. Dadurch entstehen die anfänglichen initialen Sekundärarme mit einer unterschiedlichen räumlichen Frequenz auf beiden Seiten, was am Ende in einem leichten Unterschied im Sekundärarmabstand zwischen beiden Seiten resultiert. Dieser Effekt ist insbesondere bei der 20°-Simulation zu beobachten.

Bei dem Versuch, die Anisotropie zeitlich zu mitteln, wird durch die Rotationsschritte ebenfalls eine Rauigkeit auf die erstarrende Grenzfläche aufgebracht. Diese Fluktuationen sind dabei so stark, dass sie die physikalische Grenzflächenenergieanisotropie komplett überlagern, wodurch Seaweed-Strukturen erzeugt werden. Wird der Anisotropieparameter auf unphysikalische Werte erhöht, so kann sich die gewünschte Anisotropie gegen das Rauschen durchsetzen und über große Abschnitte Wachstum in der bevorzugten Richtung erzeugen.

Es wird beobachtet, dass mit einer Verkleinerung des Drehintervalls und damit der Erhöhung der Anzahl der Rotationsschritte eine Verlangsamung des Wachstums einhergeht. Dies kann dadurch erklärt werden, dass durch die Interpolation der Festphasenanteile im Zuge der Rotation das Festphasenanteilsfeld eine gewisse Glättung erfährt. Insbesondere im Bereich der Dendritenspitze, wo das Feld der Festphasenanteile in drei Richtungen stark abfällt, hat dies eine Abstumpfung der Spitze zur Folge. Dies resultiert in einem im Weiteren etwas verlangsamten Wachstum, während dessen die Dendritenspitze auch wieder eine starke Krümmung annehmen kann. Diese wird jedoch beim nächsten Rotationsschritt wieder etwas abgestumpft. Je nach konkreter Lage des neuen zum alten Gitter kann dieser Effekt eine unterschiedliche Stärke aufweisen.

Zu großen Simulationszeiten hin steigt auch die Wachstumsgeschwindigkeit der Sekundär- und Tertiärarme, da die Unterkühlung der Schmelze stetig steigt. Das bedeutet im Umkehrschluss, dass im Verhältnis zur charakteristischen Zeitskala des Wachstums die Rotationsintervalle größer werden. Daher besitzen die späten Tertiärarme eine wesentlich schlechtere Ausrichtung an der bevorzugten Wachstumsrichtung als der Primärstamm, da bei ihnen dieselben Effekte auftreten, die bei sehr großen Intervallen über den gesamten

Wachstumszeitraum hinweg dominieren.

Die Wahl eines variablen Drehintervalls kann diesem Problem abhelfen. Tatsächlich hält ein großer Teil der Tertiär- und Sekundärarme die bevorzugte Wachstumsrichtung ein. Auch wenn an dieser Stelle noch Optimierungen möglich sind (so kann beispielsweise das Minimalintervall I_m noch wesentlich niedriger gewählt werden), so zeigt sich doch keine signifikante qualitative Verbesserung des Ergebnisses. Durch die Notwendigkeit der Wahl unphysikalischer Parameter ist auch kein quantitativer Vergleich mit analytischen Modellen möglich. Insgesamt ist das zelluläre Automaten-Modell mit der Rotationsmethode zwar funktional, es können aber trotz Richtungsunabhängigkeit nur begrenzt physikalische Schlüsse daraus gezogen werden.

Bei den quantitativen Simulationen mit Wachstum in Gitterrichtung folgt das implementierte Modell ungefähr der Kurve des analytischen Modells. Daraus lässt sich schließen, dass zumindest bei Anwendung der Höhenfunktionsberechnung der Krümmung die Kopplung des Wachstums an das Konzentrationsfeld sowie dessen Entwicklung korrekt vorhergesagt wird. Bei den Simulationen abseits der Gitterrichtung kann dies so nicht bestätigt werden. Durch die stumpfere Repräsentation der Dendritenspitze ergibt sich für fast alle Unterkühlungen eine systematische Unterschätzung der Geschwindigkeit. Ebenso treten große Schwankungen der Wachstumsgeschwindigkeit der Dendritenspitze auf. Da die Wachstumsgeschwindigkeit allerdings durch die indirekte Repräsentation der Grenzfläche lediglich abgeschätzt werden kann, kann ein Teil der Schwankungsbreite auch auf die notwendigerweise nur als Näherung implementierbare Auswertemethode zurückgeführt werden. Dennoch bleibt die Erkenntnis, dass alle Wachstumsmodi abseits der Gitterrichtung mit dem vorliegenden Modell höchstens näherungsweise simuliert werden können. Dies schließt bei den Simulationen in Gitterrichtung die Verbreiterung der Primärarme sowie die Bildung von Sekundärarmen ein, deren Charakteristika daher lediglich als qualitativ angesehen werden können. Eine quantitative Auswertung von Größen wie Sekundärarmabständen und -längen scheint daher leider nicht sinnvoll.

Die Ergebnisse bestätigen, dass insbesondere der Algorithmus der Bewegung der Grenzfläche einen großen Einfluss auf die ungewollte künstliche Anisotropie des Simulationsergebnisses besitzt. Die gewählte Methode der Krümmungsberechnung spielt ebenfalls eine

Rolle, ihr Einfluss ist jedoch wesentlich geringer. Mit Anwendung der hier vorgestellten Anisotropiekorrektur und der Krümmungsberechnung mittels der Höhenfunktion ist zwar nun prinzipiell möglich, dendritische Strukturen auch abseits der Gitterrichtung zu simulieren. Allerdings sind die Ergebnisse quantitativ nur bedingt auswertbar. Dennoch konnte durch die hier vorgestellten Modifikationen der Zelluläre Automaten-Methode der Gittereinfluss zwar nicht vollständig beseitigt, wohl aber signifikant verringert werden.

4. “Meshless Front Tracking”

4.1. Gitterlose Methoden für amorphe Punktemengen

4.1.1. Isotropes Gitter

Grundprinzip

Es wurde eine Punktanordnung gesucht, welche keine Fernordnung aufweist, aber dennoch eine stabile Simulation ermöglicht. Daher kamen die in der Literatur gebräuchlichen “verschobenen” Gitter (siehe 2.2.4) nicht in Betracht, da sie bei niedriger Verschiebungsamplitude das erste Kriterium nicht erfüllen, bei hoher das zweite. Obwohl auch andere zufällige Punktverteilungen in der Literatur zu finden sind, wird meist keine Aussage über ihre Erzeugung getroffen. Daher wurde für diese Arbeit ein auf [3] beruhender Algorithmus entwickelt. Er beruht auf zwei Grundgedanken:

1. Ein komplett isotropes Gitter ohne Fernordnung kann durch eine zufällige Platzierung aller Gitterpunkte erzeugt werden.
2. Um eine gewisse Stabilität der Simulation zu gewährleisten, wird ein minimaler paarweiser Abstand Δd zwischen allen Punkten vorge-schrieben.

Wie im Anhang B.5 gezeigt, liegt die auf diese Weise in zwei Dimensionen erreichbare Punktdichte in Abhängigkeit vom Mindestabstand zwischen $\rho_{\min} = \left(\frac{3\sqrt{3}}{2}\Delta d^2\right)^{-1} \approx 0,385\Delta d^{-2}$ und $\rho_{\max} = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}\Delta d^2\right)^{-1} \approx 1,115\Delta d^{-2}$.

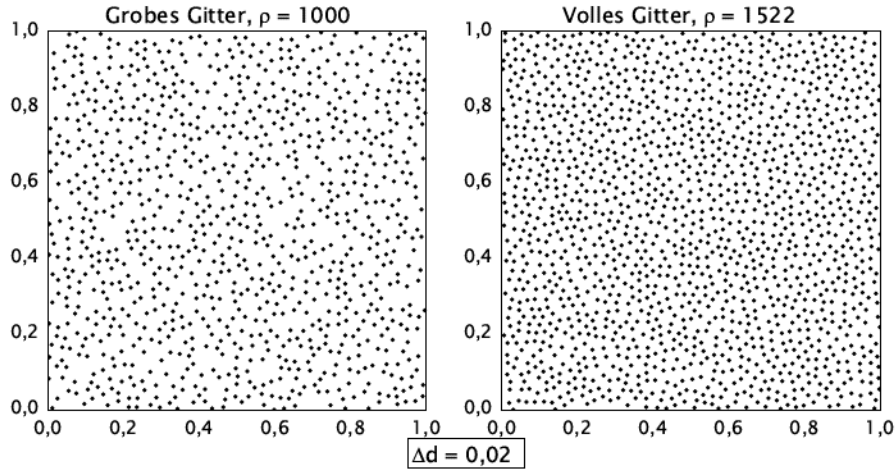


Abbildung 4.1: Zwei verschiedene Gitter mit $\Delta d = 0,02$.

Erzeugung zweidimensionaler isotroper Gitter

Zur Gittererzeugung wurde iterativ jeweils ein neuer zufälliger Punkt gesucht, und dann dessen Abstand zu allen schon gesetzten Punkten geprüft. Hielt dieser zu allen bis dahin gesetzten Punkten den Mindestabstand ein, so wurde er in das Gitter eingefügt, ansonsten wurde er verworfen. Für die Iteration wurden zwei verschiedene Abbruchkriterien festgelegt, die zu unterschiedlichen Gittern führte:

Grob: Für grobe Gitter wurde eine konstante Punktdichte von $0,4\Delta d^{-2}$ vorgegeben.

Voll: Bei “vollen” Gitter wurde versucht, eine möglichst große Anzahl an Punkten in das Gitter einzufügen. Dafür wurde erst dann abgebrochen, wenn ein neu zu setzender Punkt nach so vielen Versuchen, wie bereits Punkte im Gitter vorhanden sind, nicht mehr gesetzt werden konnte. Es wurden damit Punktdichten im Bereich von $0,7\Delta d^{-2}$ erreicht.

Beispiele für beide Gittertypen sind in Abbildung 4.1 gezeigt.

Wenn Randbedingungen vorgegeben waren, wurden darüber hinaus Gitterpunkte auf dem Rand benötigt. Diese wurden vor den Volumenpunkten, aber auf die selbe Weise wie diese gesetzt. Alle Simulationen mit Randbedingungen wurden in dieser Arbeit auf groben Gittern durchgeführt. Bei diesen betrug die Anzahl an zu setzenden Randgitterpunkten $2\sqrt{N}(\sqrt{l_1/l_2} + \sqrt{l_2/l_1})$ (mit den Seitenlängen der rechteckigen Domäne l_1 und l_2 sowie der

Gesamtzahl an zu setzenden Punkten $N = \rho l_1 l_2$).

4.1.2. Auswahl der gitterlosen Interpolationsmethode

Zur Auswahl der gitterlosen Interpolationsmethode wurde ein eindimensionales Diffusionsproblem auf einem zufälligen Gitter mit verschiedenen Interpolations- und Integrationsmethoden berechnet: Das zu lösende Problem war die Diffusion eines (zur Zeit $t = 0$) δ -förmigen Impulses mit Einheitsfläche, welche eine analytische Lösung besitzt [90]. Der Diffusionskoeffizient wurde auf eins gesetzt, als Ausgangszustand wurde die analytische Lösung zum Zeitpunkt 0,01 gewählt, die Randbedingungen waren periodisch.

Das eindimensionale Gitter bestand aus 200 zufällig platzierten Punkten auf dem Intervall $(0;1]$ mit einem paarweisen Mindestabstand von $\Delta d = 0,003$. Die Parameter für die lokalen Interpolationsmethoden wurden so gewählt, dass nur Punkte mit einem Abstand zum Interpolationspunkt kleiner als $R_0 = 0,08$ zur Interpolation beitragen. Dies sind im Schnitt 32, bei dem erzeugten Gitter bewegten sie sich zwischen 28 und 37. Der Zeitschritt wurde zu 10^{-6} gewählt.

“Klassische” gitterlose Methoden

Als “klassische” Interpolationsmethoden wurden gleitende kleinste Quadrate (GWQ, B.3.2), die diffuse Approximation (DAM, B.3.3) sowie radiale Basisfunktionen (RBF, B.3.1) gewählt. Für die beiden Anpassungsmethoden GWQ und DAM wurde eine vollständige monomische Basis zweiter Ordnung gewählt. Als Wichtungsfunktion wurde für beide die polynomische Wichtungsfunktion aus [91] gewählt:

$$w_t(x) = \begin{cases} 1 - 6 \frac{(x_t - x)^2}{R_0^2} + 8 \frac{|x_t - x|^3}{R_0^3} - 3 \frac{(x_t - x)^4}{R_0^4} & |x_t - x| \leq R_0 \\ 0 & |x_t - x| > R_0 \end{cases} \quad (4.1)$$

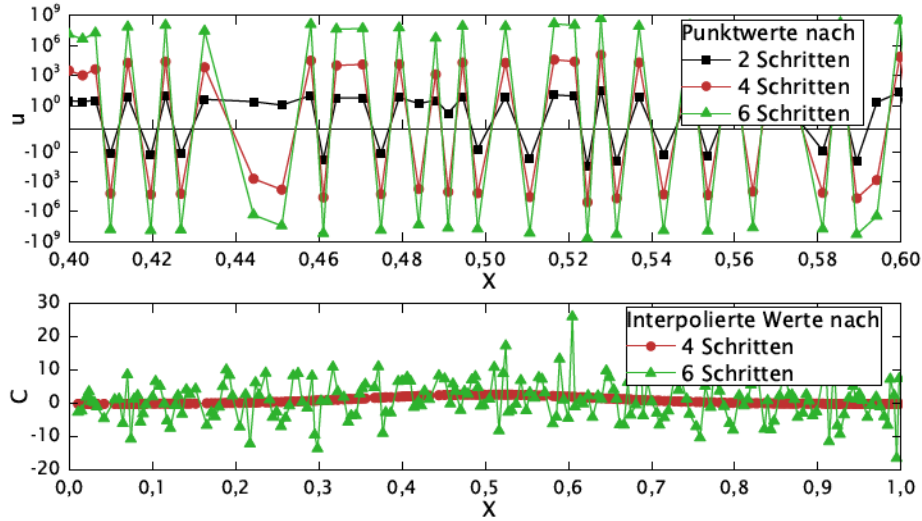


Abbildung 4.2.: Divergente Simulation mit DAM und Kollokation. *Oben:* Werte der Knoten in einem Ausschnitt der Domäne nach 2, 4 und 6 Simulationsschritten. *Unten:* Werte der DAM-Interpolation nach 4 und 6 Schritten

Die lokale Radiale Basisfunktion wurde dem selben Buch entnommen [92]:

$$R_t(x) = \begin{cases} \left(1 - \frac{|x_t - x|}{R_0}\right)^6 \left(6 + 36 \frac{|x_t - x|}{R_0} + 82 \frac{(x_t - x)^2}{R_0^2} + 72 \frac{(x_t - x)^3}{R_0^3} + 30 \frac{(x_t - x)^4}{R_0^4} + 5 \frac{(x_t - x)^5}{R_0^5}\right) & |x_t - x| \leq R_0 \\ 0 & |x_t - x| > R_0 \end{cases} \quad (4.2)$$

Als Integrationsmethode kam zum einen Kollokation zum Einsatz, zum anderen die schwache Formulierung mit einem Integrationsintervall, welches dem Nachbarschaftsintervall entsprach, also in einem Bereich $\pm 0,08$. Zur Integration wurde Gaußsche Quadratur mit fünf Stützstellen eingesetzt. Als Testfunktion wurde eine Konstante gewählt.

Es zeigte sich, dass bis auf die RBF-Methode mit Kollokation alle anderen fünf Kombinationen ein exponentielles Wachstum des numerischen Fehlers im Laufe der Simulation zeigten. Bei den Simulationen mit GWQ und DAM überschritt das Rauschniveau bereits nach wenigen Simulationsschritten die simulierten Werte. Bei der RBF mit schwacher Formulierung zeigten sich hingegen schwächere, aber dennoch exponentiell anwachsende Fehler.

Bei den kleinste-Quadrate-Methoden zeigte sich, dass die interpolierte Lösung zwar über die ersten Rechenschritte hinweg glatt blieb und sich wie die analytische Lösung verhielt. Gleichzeitig fingen allerdings die Werte der Punkte an, stark zu oszillieren und Werte anzunehmen, die mehrere Größenordnungen über den interpolierten Werten lagen.

Es wurde also das korrekte Konzentrationsfeld durch eine Linearkombination von Punktwerten dargestellt, deren Betrag mehrere Größenordnungen darüber lag. Während dieser Algorithmus mathematisch korrekt ist, kommt es numerisch nach wenigen Schritten zu Darstellungsfehlern, die dann in der Lösung sichtbar werden. Dieses Verhalten ist beispielhaft in Abbildung 4.2 für die DAM-Interpolation mit Kollokation gezeigt: Während nach vier Simulationsschritten bei Punktwerten in der Größenordnung von 10^3 die Interpolation noch relativ glatt aussieht, erreichen nach sechs Schritten die Knotenwerte eine Größenordnung von 10^7 und gleichzeitig die numerischen Fehler die Größenordnung der interpolierten Werte.

Die Ursache dieses Verhaltens rührt daher, dass die Matrix, die für die Zeitintegration invertiert werden muss, schlecht konditioniert ist, also in ihr und ihrer Inversen sehr große und sehr kleine Werte (die also große Unterschiede in ihrer Größenordnung haben) auftauchen. Bei Rechenoperationen mit Zahlen mit stark unterschiedlicher Größenordnung entstehen allerdings große numerische Fehler, was den beobachteten Effekt erklärt.

Da es eben diese Matrixinversion ist, die auch gleichzeitig die Benutzung größerer Punktmengen stark erschwert, wurde eine Variante entwickelt, die Integrationsmethode für kleinste-Quadrate-Interpolationen so umzuformulieren, dass diese Operation vermieden wird.

Vereinfachte Kollokation für kleinste-Quadrate-Interpolationen

In [69] wurde die Differenz zwischen Punktwert und interpoliertem Wert als Maß für die lokale Qualität der Interpolation herangezogen. Da es allerdings bei den kleinste-Quadrate-Methoden die Punktwerte sind, die weit von der (korrekten) Interpolation abweichen, wird in der vereinfachten Kollokation nicht die Interpolation verändert, sondern die Punktwerte. Unter der Annahme, dass die Punktwerte nicht stark fluktuieren, sondern ein hinreichend glattes Feld ergeben, kann davon ausgegangen werden, dass die Werte des interpolierten Feldes zumindest nahe bei den Punktwerten sind. Anders ausgedrückt: Wenn man die Punktwerte durch die Werte des interpolierten Feldes ersetzt, so ergibt sich ein neues interpoliertes Feld, welches nur schwach vom vorherigen interpolierten Feld

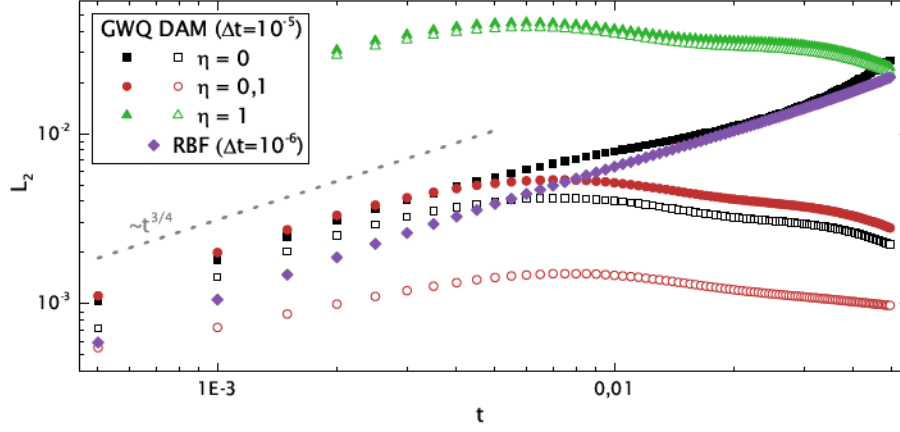


Abbildung 4.3.: Entwicklung des mittleren quadratischen Fehlers während der Simulation mit unterschiedlichen Verfahren: DAM und GWQ mit vereinfachter Kollokation und unterschiedlichen Werten des Glättungsparameters η , RBF mit klassischer Kollokation.

abweicht:

$$u_t \approx C(\vec{x}_t) \quad (4.3)$$

Dann kann man die Kollokationsgleichung (B.52) (Siehe B.4.3) umschreiben zu

$$\mathbf{u}^{t+\Delta t} = (D\Delta t(\Delta\Phi) + \mathbb{I})\mathbf{u}^t \quad (4.4)$$

Dies kann so interpretiert werden, dass die Punktwerte die tatsächlichen Konzentrationen angeben, deren zweite Ableitung lediglich durch die Interpolation bestimmt wird. Unter der Annahme, dass das interpolierte Feld immer glatter sein wird als die Punktwerte, kann das Feld auch noch geglättet werden, indem der *Punkt*wert im nächsten Zeitschritt aus dem interpolierten *Konzentrations*wert und seiner Ableitung in diesem Zeitschritt berechnet wird:

$$\mathbf{u}^{t+\Delta t} = (D\Delta t(\Delta\Phi) + \Phi)\mathbf{u}^t \quad (4.5)$$

Dies resultiert in einer weiteren Glättung der Lösung, die nun durch die Punktwerte dargestellt wird. Die Stärke dieser Glättung kann durch Einführung eines Parameters η eingestellt werden:

$$\mathbf{u}^{t+\Delta t} = (D\Delta t(\Delta\Phi) + \eta\Phi + (1-\eta)\mathbb{I})\mathbf{u}^t \quad (4.6)$$

Dies bedeutet, dass der Zustand aller Punkte im nächsten Schritt durch die Multiplikation der Matrix

$$U = D\Delta t(\Delta\Phi) + \eta\Phi + (1 - \eta)\mathbb{1} \quad (4.7)$$

mit dem aktuellen Zustand berechnet wird. Die Matrix U stellt also den Zeitschritt-Operator dar.

Sowohl für GWQ als auch für DAM wurden diese Varianten implementiert und am oben beschriebenen Testfall untersucht, diesmal mit einem vergrößerten Zeitschritt von $\Delta t = 10^{-5}$. Die Entwicklung des mittleren quadratischen Fehlers für vereinfachte Kollokation ($\eta = 0$), vollständige Glättung ($\eta = 1$) und partielle Glättung ($\eta = 0,1$) ist in Abbildung 4.3 gezeigt. Es ist zu sehen, dass die Simulationen über lange Zeiträume stabil laufen und nur noch schwaches Fehlerwachstum ($\propto t^{3/4}$) auftritt. Ohne Glättung divergiert lediglich die GWQ-Methode mit vereinfachter Kollokation bei großen Zeitschritten, während dies mit Glättung nicht mehr auftritt. Bei partieller Glättung ist das Fehlerniveau der untersuchten Varianten am geringsten. Das Verhalten ist bei partieller Glättung sogar besser als das der RBF mit kleinerem Zeitschritt. Zusätzlich zur Tatsache, dass DAM einen geringeren Rechenaufwand als GWQ erfordert, liefert sie auch ein konsistent niedrigeres Fehlerniveau. Für das Erstarrungsmodell wurde daher die lokale DAM mit vereinfachter Kollokation mit Glättungsparameter implementiert.

4.2. Repräsentation der Grenzfläche durch Partikel

4.2.1. Nichtanwendbarkeit klassischer Partikel-Verfahren für gitterlose Methoden

Aufgrund der Repräsentation des Raumes durch Punkte statt durch Elemente lassen sich klassische Partikelverfahren zur Grenzflächendarstellung nur in eingeschränkter Weise für gitterlose Methoden anwenden, da viele Eigenschaften klassischer Partikelmethode direkt mit der zugrundeliegenden Aufteilung des Raumes zusammenhängen.

So lässt sich bei Vorhandensein eines Elementgitters aufwandsarm prüfen, wo die Grenzfläche in Beziehung zu einem bestimmten Punkt liegt: Entweder die Grenzfläche hat a)

dessen Element noch nicht berührt oder b) schon vollständig durchquert, oder c) sein Element beinhaltet Partikel, die Grenzfläche befindet sich also innerhalb dessen. In diesem Fall muss die Grenzfläche lediglich lokal aus dem/den Partikel/n des Elementes und gegebenenfalls dessen Nachbarn konstruiert werden. Bei einer gitterlosen Methode ist solch ein einfacher Test nicht möglich.

Durch das Vorhandensein der Elemente und das Wissen ihrer räumlichen Beziehungen zueinander lässt sich bei klassischen Methoden auch die relative Anordnung der Partikel untereinander aufwandsarm bestimmen, da sie anhand ihrer Lage in einem bestimmten Element schon eine grobe Ordnung besitzen. Damit wird beispielsweise eine Durchnummerierung der Grenzflächenpartikel ermöglicht, was einfache Verfahren zur Bestimmung der Grenzflächengeometrie und -topologie ermöglicht. Eine solche Ordnung ist bei gitterlosen Methoden nur mit großem Aufwand zu erzielen.

Im Gegenzug bietet allerdings die Partikel-Repräsentation der Grenzfläche auf Grundlage einer gitterlosen Repräsentation des Raumes die Möglichkeit, die Partikel direkt an der Lösung der zugrundeliegenden partiellen Differentialgleichung teilhaben zu lassen. Während bei klassischen Methoden dafür zusätzliche Extrapolations- bzw. Interpolationsschritte für die Einbeziehung der Gitterpunkte in die Lösung der Differentialgleichung, bzw. zur Berechnung des Feldes am Ort der Partikel notwendig sind, kann bei gitterlosen Methoden dieselbe Interpolationsmethode für Partikel und Domänenpunkte angewandt werden. Für die zwei vorher genannten Problemstellungen mussten jedoch im Rahmen dieser Arbeit neue Lösungen gefunden werden.

4.2.2. Grundlegendes Konzept für gitterlose Methoden

Als Grundkonzept wurde ein Ansatz ähnlich dem von La Rocca und Power [84] gewählt: Es gibt einerseits eine Menge an stationären Punkten, die die Domäne repräsentieren (nun “Gitterpunkte” genannt), andererseits eine Menge an sich bewegenden Punkten (im Weiteren “Partikel” genannt) welche die fest-flüssig-Grenzfläche darstellen. Im Gegensatz zu [84] soll allerdings auch unterschieden werden können, zu welcher Phase ein gegebener Gitterpunkt gehört.

Um dies zu erreichen, werden die Grenzflächenpartikel nicht frei auf der Grenzfläche

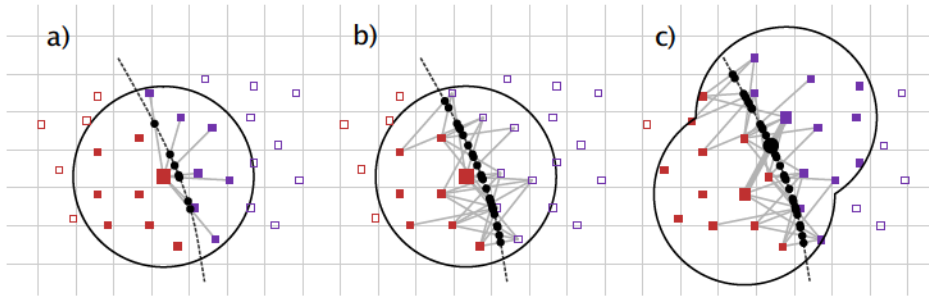


Abbildung 4.4.: Partikelkonzept: a) Zwischen jedem Punkt und dessen Nachbarn unterschiedlicher Phasenzugehörigkeit (*rot, blau*) befindet sich genau ein Partikel (*schwarz*). b) Für die Interpolationsberechnungen an diesem Punkt nehmen dessen Nachbarn mit anderer Phasenzugehörigkeit (*offen*) nicht teil. Stattdessen nehmen alle Partikel, die zu Punktpaaren in seiner Nachbarschaft gehören teil. c) An den Interpolationsrechnungen an einem Partikel nehmen alle Punkte aus der Nachbarschaft seiner beider zugehörigen Punkte teil, ebenso wie alle Partikel, die sich zwischen Punktpaaren aus dieser kombinierten Nachbarschaft befinden.

verteilt. Stattdessen sind jedem Partikel zwei benachbarte Gitterpunkte unterschiedlicher Phasenzugehörigkeit zugeordnet. Dabei gelten zwei Gitterpunkte genau dann als benachbart, wenn sie gegenseitig Einfluss auf ihre jeweilige Interpolation nehmen, d.h. ihr Abstand kleiner als R_0 ist. Umgekehrt existiert zwischen jedem benachbarten Gitterpunktpaar unterschiedlicher Phasenzugehörigkeit ein Partikel (siehe Abbildung 4.4a). Die Bewegung dieses Partikels ist auf die Gerade durch diese beiden Punkten beschränkt.

Auf diese Weise lässt sich unmittelbar feststellen, wann die Grenzfläche einen Gitterpunkt passiert hat und dieser seine Phasenzugehörigkeit ändert. Gleichzeitig existiert allerdings keine globale Ordnung und “Buchhaltung” der Partikel, sodass alle Nachbarschaftsbeziehungen unter den Partikeln über deren zugehörige Knoten und deren Nachbarschaften definiert werden müssen.

4.2.3. Kopplung zwischen Grenzfläche und Konzentrationsfeld

Befindet sich die Grenzfläche in der Nähe eines Gitterpunktes, so muss dieser Umstand bei der Interpolation des Konzentrationsfeldes berücksichtigt werden. Für die Berechnung an den Gitterpunkten hat dies zwei Effekte (Abbildung 4.4b):

1. Zu einem Gitterpunkt benachbarte Gitterpunkte, die zur anderen Phase gehören, nehmen nicht an der Interpolation an dessen Ort teil.

2. Die Grenzfläche nimmt über die Partikel an der Interpolation teil. Dafür werden all jene Partikel verwendet die zu solchen Punktpaaren gehören, deren beider Punkte innerhalb der Nachbarschaft der gegenwärtigen Interpolation liegen.

Zur Berechnung der Ableitungen an der Grenzfläche, die für die Berechnung deren Geschwindigkeit benötigt werden (Gleichung (3.2)), wird an jedem Partikel für jede der zwei angrenzenden Phasen eine Interpolation durchgeführt. An diesen nehmen alle Gitterpunkte der jeweiligen Phase in der Umgebung des Partikels sowie alle benachbarten Partikel teil. Die Menge der teilnehmenden Gitterpunkte ist dabei die Vereinigung der beiden Nachbarschaften der zu dem Partikel zugehörigen Punkte. Die Menge der teilnehmenden Partikel ist die Menge aller Partikel, deren zugehörige Gitterpunkte zu dieser vereinigten Nachbarschaft gehören (Abbildung 4.4c).

4.2.4. Bestimmung der Grenzflächengeometrie

Die Grenzflächengeometrie wird in einem Zweischrittverfahren nach [93] berechnet, welches unabhängig von der Ausrichtung der Grenzfläche zum Koordinatensystem ist. Für die Berechnung der Geometrie an einem Partikel werden alle Partikel einbezogen, die auch für die Interpolation des Konzentrationsfeldes an diesem Partikel herangezogen wurden (s.o.).

Im ersten Schritt wird die Normalenrichtung der Grenzfläche durch eine Näherung mit gewichteten kleinsten Abstandsquadraten bestimmt: Es wird diejenige Gerade gesucht, zu der die abstandsgewichtete Summe der Quadrate der Abstände der Partikel minimiert wird

(Abbildung 4.5a; Mathematische Beschreibung: siehe B.2.2). Zur Wichtung wird dabei die Wichtungsfunktion der DAM-Interpolation benutzt. Die Normalenrichtung der Grenzflä-

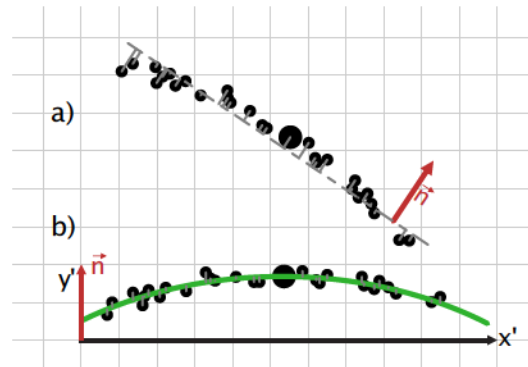


Abbildung 4.5.: Bestimmung der Grenzflächengeometrie. a) Die Normalenrichtung (*rot*) wird mittels einer Näherung mit gewichteten kleinsten Abstandsquadraten bestimmt. b) Die tatsächliche Geometrie der Grenzfläche wird über die Anpassung eines Polynoms zweiter Ordnung (*grün*) im Koordinatensystem der Normalen bestimmt.

che an diesem Punkt steht dann senkrecht zu dieser Geraden. Der neu berechnete Normalenvektor wird dabei so orientiert, dass sich die Orientierung der Grenzfläche nicht verändert:

$$\vec{n}_{\text{alt}} \cdot \vec{n}_{\text{neu}} > 0 \quad (4.8)$$

Dies bedeutet, dass auch neu erzeugte Partikel einen Normalenvektor benötigen. Dafür muss ihnen zu Simulationsbeginn je nach Startzustand eine passende Normale vorgegeben werden. Nach Phasenwechsel eines Punktes (s.u.) neu erzeugte Partikel erhalten die Normale eines der den Phasenwechseln initiiierenden Partikels.

Zur Berechnung der Grenzflächenkrümmung wird nun im Koordinatensystem der gefundenen Geraden und der Grenzflächennormalen eine klassische gewichtete kleinste-Quadrate-Anpassung (siehe B.2.1) für eine Parabel, die den Partikel schneidet, durchgeführt (Abbildung 4.5b). Als Grenzflächenkrümmung wird dann die Krümmung der angepassten Parabel am Ort des Partikels angenommen.

4.2.5. Grenzflächenbewegung

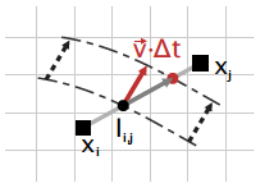


Abbildung 4.6.: Bewegung der Grenzfläche durch Veränderung der Partikelposition (siehe Text)

Die Grenzfläche bewegt sich immer in ihre Normalenrichtung. Diese stimmt im Allgemeinen nicht mit dem Bewegungspfad des Partikels überein, welcher ja durch dessen zwei Gitterpunkte vorgegeben ist. Um die neue Position des Partikels auf seinem Bewegungspfad zu bestimmen, wird daher die in Abschnitt 4.2.4 bestimmte Parabel, um den Verschiebungsvektor $\vec{v}\Delta t$ verschoben und der Schnittpunkt zwischen dieser verschobenen Parabel und dem Bewegungspfad des Partikels bestimmt (siehe Abbildung 4.6). Von den im Allgemeinen

zwei Schnittpunkten wird dann derjenige ausgewählt, der näher an der vorherigen Position liegt.

4.2.6. Änderung der Phasenzugehörigkeit eines Gitterpunktes

Bewegt sich ein Partikel durch die Bewegung auf der Geraden durch seine zwei zugehörigen Punkte über einen der beiden Punkte hinaus, so wechselt dieser seine Phasenzugehörigkeit. Alle Partikel, die dem überschrittenen Punkt bis dahin zugeordnet waren, werden gelöscht. Gleichzeitig werden neue Partikel zwischen ihm und denjenigen seiner Nachbarn erzeugt, die nun eine von ihm unterschiedliche Phasenzugehörigkeit haben. Die Positionen dieser neuen Partikel werden durch den

Schnittpunkt ihrer Bewegungspfade mit der Grenzflächenparabel des auslösenden Punktes berechnet (siehe Abbildung 4.7). Existieren mehrere auslösende Punkte, so wird dafür aus deren Grenzflächenparabeln zufällig eine ausgewählt.

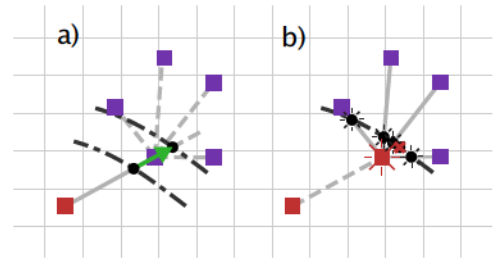


Abbildung 4.7.: Änderung der Phasenzugehörigkeit eines Punktes: Bewegt sich ein Partikel über einen seiner Punkte hinaus (a), so verändert dieser seine Phasenzugehörigkeit und es werden neue Partikel erzeugt (b).

4.2.7. Dichtewichtung

Durch die festgelegten Bewegungspfade der Partikel besitzt die Grenzfläche eine ungleichmäßige Partikeldichte entlang ihres Pfades. Kommt zum Beispiel die Grenzfläche einem Gitterpunkt sehr nah, so sind auch zwingend die zu diesem Gitterpunkt gehörenden Partikel sehr nah bei diesem, und damit auch nahe beieinander. Eine schwankende Punktdichte hat allerdings gleichzeitig einen negativen Einfluss auf die in der Diffusions- und Geometrieberechnung durchgeführten kleinste-Quadrate-Anpassungen, da dadurch verschiedene Stellen der Grenzfläche verschieden stark gewichtet werden. Dies hat insbesondere einen Einfluss auf die Simulation instabiler Grenzflächen, da bei dieser die Krümmung eine bedeutende Rolle spielt. Daher wurde bei den Simulationen instabiler Grenzflächen eine Dichtewichtung implementiert.

Dabei wird in jedem Schritt zu jedem Partikel und Punkt eine Objektdichte bestimmt. Zu diesem Zweck wird um jeden Punkt und Partikel in der Domäne eine zweidimensionale Glockenkurve $e^{-\frac{x^2+y^2}{2\sigma^2}}$ mit einer Standardabweichung von $\sigma = \frac{\Delta d}{8}$ gelegt und deren Werte am

Ort der Dichteberechnung addiert. In allen kleinste-Quadrate-Berechnungen wird dann zusätzlich zur Wichtungsfunktion noch mit der reziproken Objektdichte an deren Ort gewichtet.

Eine beispielhafte Auswertung einer Simulation einer instabilen Grenzfläche im späten Stadium mit knapp 180000 aktiven Partikeln ergab sich für die Objektdichte eine logarithmische Normalverteilung mit einem Maximum von 17,13, einem Erwartungswert von 18,16 und einer Standardabweichung von 5,30.

4.2.8. Fehlerminimierung durch deaktivierte Partikel

Dem gesamten bis hierher beschriebenen Algorithmus liegt die Annahme zugrunde, dass sich benachbarte Partikel nahe beieinander befinden und eine zusammenhängende Grenzfläche markieren. Aufgrund der nichtvorhandenen direkten Verwaltung der Partikel ist jedoch nicht definitiv festzustellen, wann die durch die Partikel gebildete Grenzfläche ihre Glattheit verliert. Daher wurden Kriterien gesucht, die insbesondere einzeln stehende Partikel identifizieren sollen. Diese Kriterien sind:

1. Während der Geometrieberechnung wird festgestellt, dass sich zu wenige Partikel (< 5) in der direkten Nachbarschaft des Partikels befinden
2. Die kleinste-Quadrate-Anpassung für die Geometrieberechnung schlägt fehl. Dies geht meist mit der ersten Bedingung einher.
3. Bei der Partikelbewegung bzw. Glättung dessen Position kann kein Schnittpunkt zwischen Parabel und Bewegungspfad gefunden werden, oder die Schnittpunkte sind beide unrealistisch weit von seiner gegenwärtigen Position entfernt.

Erfüllt ein Partikel eines dieser Kriterien, so wird es deaktiviert. Ein weiteres Kriterium dient der Vorbeugung von Fehlern bei der Grenzflächenbewegung: Nimmt der Bewegungspfad des Partikels einen zu großen Winkel ($> 75^\circ$) zur Grenzflächennormalen ein, so wird es ebenfalls deaktiviert.

Deaktivierte Partikel nehmen an keiner Berechnung mehr teil, sie sind gleichsam unsichtbar für alle anderen Partikel und Gitterpunkte. Ändert einer der beiden einem de-

aktivierten Partikel zugeordneten Gitterpunkte seinen Zustand, so wird das deaktivierte Partikel zusammen mit allen anderen zu diesem Punkt gehörenden Partikeln gelöscht.

4.3. Simulationsergebnisse

4.3.1. Gitter- und Simulationsparameter

Der Nachbarschaftsradius wurde so gewählt, dass die gitterlose kleinste-Quadrate-Interpolation garantiert lösbar ist. Dies ist dann der Fall, wenn Eckpunkte mindestens fünf Nachbarn besitzen. Bei gleichem Radius der Nachbarschaft bedeutet das, dass Punkte in der Domäne mindestens 20 Nachbarn besitzen. Dies war für grobe Gitter bei einem Radius der Nachbarschaft von $5\Delta d$ der Fall. Bei diesem unterschritt die Zahl der Nachbarn von Domänenpunkten nie die 20, während die mittlere Nachbarzahl im Bereich der 30 lag. Für volle Gitter mit demselben Nachbarradius lag die Anzahl der Nachbarn im Mittel bei 50.

Vorläufige Testreihen zeigten, dass das Modell ungefähr bis zu einer Größe des Zeitschritts von $\Delta d^2/4D$ stabil war. Für die Konvergenzuntersuchung (siehe nächster Abschnitt) wurde ein Zeitschritt von $\Delta d^2/40D$ gewählt, für alle anderen Simulationen $\Delta d^2/4D$.

4.3.2. Untersuchung des Konvergenzverhaltens: 2D-Diffusion

Um die Konvergenzeigenschaften der Simulation mit DAM-Interpolation und expliziter Zeit-vorwärts-Integration zu untersuchen, wurde ein zweidimensionales Diffusionsproblem simuliert, für das eine analytische Lösung bekannt ist.

Diffusionsproblem: Dissipation eines Wärmeimpulses

Simuliert wurde ein zeitlicher Ausschnitt des Prozesses der Dissipation eines Wärmeimpulses: Zur Zeit $t = 0$ wird ein δ -förmiger Puls in die Mitte der quadratischen Domäne mit einer Seitenlänge von eins eingebracht. Dieser beginnt mit fortlaufender Zeit, sich nach der Wärmeleitungsgleichung zu verbreitern. Die analytische Lösung dieses Problems wurde der Literatur entnommen [90, 94].

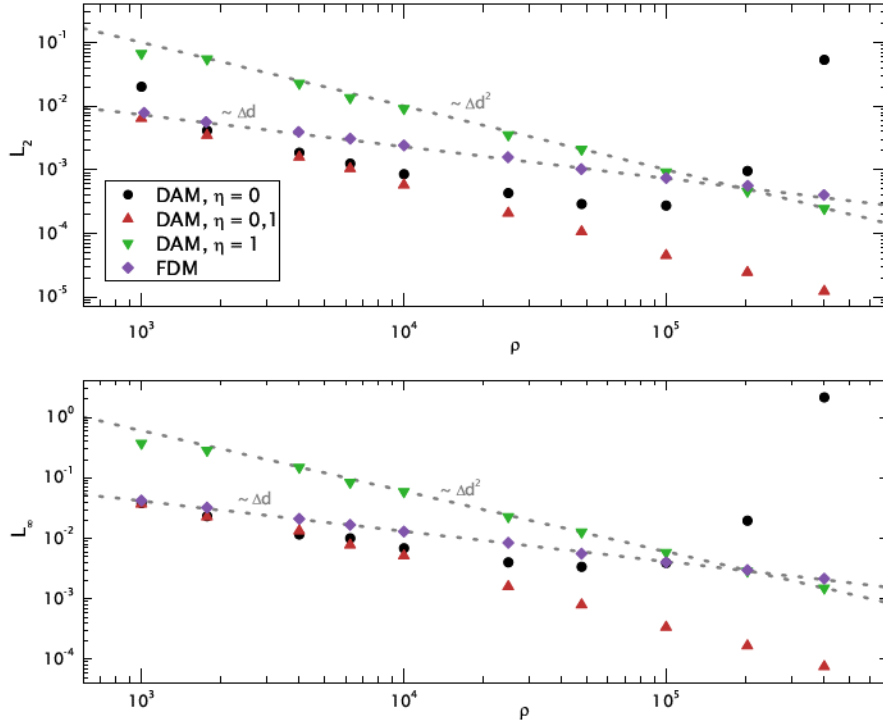


Abbildung 4.8.: Konvergenzverhalten anhand des mittleren quadratischen Fehlers L_2 (oben) sowie des maximalen Fehlers L_∞ (unten) in Abhängigkeit von der Punktdichte ρ für DAM mit unterschiedlichen Glättungsparametern η sowie für FDM.

Die Temperaturleitfähigkeit wurde einheitenlos auf eins festgelegt. Als Startzustand der Simulation wurde die analytische Lösung zur Zeit $t_0 = 0,01$ gewählt. Danach wurde die Entwicklung des Wärmepulses bis zur Zeit $t_e = 0,011$ simuliert und das Ergebnis mit der analytischen Lösung $T^a(\vec{x}, t)$ verglichen. Diese wird durch eine unendliche, allerdings exponentiell abfallende und damit rasch konvergierende Summe beschrieben. In diesem Modell wurde diese Summe im Bereich von $n = -100 \dots 100$ berechnet.

Mittels der analytischen Lösung wurden dann sowohl der mittlere quadratische Fehler $L_2 = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{t=1}^N (T_t - T^a(\vec{x}_t, t_e))^2}$ als auch der maximale Fehler $L_\infty = \max_{t=1 \dots N} |T_t - T^a(\vec{x}_t, t_e)|$ über alle Gitterpunkte bestimmt. Für die Simulation kamen grobe Gitter zum Einsatz. Zum Vergleich wurde das Diffusionsproblem ebenfalls mit einer FD-Methode (auf Grundlage des zelluläre Automaten-Modells) simuliert.

Konvergenzverhalten

Für verschiedene Werte des Glättungsparameters η wurde das Konvergenzverhalten der Methode bei Zunahme der Punktdichte untersucht (Abbildung 4.8). Bei Glättungsparametern größer Null zeigte sich eine quadratische Abnahme des Fehlers mit der Verringerung der Längenskala im gesamten betrachteten Bereich. Ohne Glättung folgt der Fehler diesem Trend lediglich bei geringen Punktdichten, während er zu hohen Punktdichten hin wieder stark ansteigt. Die FDM zeigte hingegen Konvergenzverhalten erster Ordnung.

In Abbildung 4.9 ist die Entwicklung des maximalen Fehlers im Laufe einer Simulation anhand dreier Zeitpunkte gezeigt. Es zeigt sich, dass ohne eine Glättung der Fehler der Simulation exponentiell wächst, während er unter Benutzung der Glättung eine Sättigung erreicht. Wie auch schon bei dem eindimensionalen Testproblem zeigt sich das Fehlerniveau bei einer nur teilweisen Glättung am niedrigsten.

Auf Grundlage der in diesem Abschnitt gesammelten Erkenntnisse wurde daher in den weiteren Simulationen ausschließlich mit $\eta = 0,1$ gearbeitet.

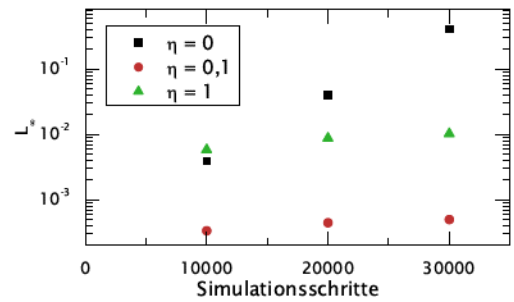


Abbildung 4.9.: Entwicklung des maximalen Fehlers im Laufe der Simulation ($\rho = 10^4$) bei unterschiedlichen Glättungsparametern η .

4.3.3. Diffusion mit Grenzfläche: Gerichtete Erstarrung

Gerichtete Erstarrung

Zur Untersuchung der Qualität der Kopplung der Grenzflächenbewegung an das Konzentrationsfeld wurde das Problem der gerichteten Erstarrung simuliert. Dabei wird eine Probe aus einer flüssigen binären Legierung mit der Ausgangskonzentration C_0 von einer Seite her abgekühlt, sodass die Schmelze von dieser Seite ausgehend gerichtet erstarrt. Diese Abkühlung kann durch einen konstanten Temperaturgradienten dT/dx , dessen Isothermen sich mit konstanter Geschwindigkeit v durch den Tiegel bewegen, beschrieben werden. Der resultierende Erstarrungsprozess kann im Allgemeinen als aus drei Abschnitten bestehend beschrieben werden:

1. Der Anfangsbereich, in welchem der Festkörper zunächst mit einer Konzentration kC_0 (mit dem Verteilungskoeffizienten $k < 1$, ohne Beschränkung der Allgemeinheit) erstarrt und die erstarrende Konzentration mit der Zeit bis auf C_0 ansteigt.
2. Der stationäre Zustand, in welchem die erstarrende Konzentration C_0 beträgt und sich die fest-flüssig-Grenzfläche mit derselben Geschwindigkeit durch den Tiegel bewegt wie die Isothermen des Temperaturgradienten.
3. Der finale Bereich, in welchem das Konzentrationsfeld der Erstarrungsfront durch das Probenende beeinflusst wird und die erstarrende Konzentration wieder steigt.

Unter den Annahmen, dass a) die Diffusion in der erstarrten Phase vernachlässigt werden kann, b) die fest-flüssig-Grenzfläche eben und im thermodynamischen Gleichgewicht ist, sowie c) der Diffusionskoeffizient D_l in der flüssigen Phase und d) der Verteilungskoeffizient $k = C_s^*/C_l^*$ jeweils konstant, also temperatur- und konzentrationsunabhängig sind, können die resultierende Konzentrationsverteilung im erstarrten Festkörper am Anfang bzw. im finalen Bereich [95] sowie der Konzentrationsverlauf in der flüssigen Phase vor der Grenzfläche im Bereich des stationären Zustandes [96] analytisch beschrieben werden.

Simulationsparameter

Die Simulation wurde auf einem groben Gitter mit einer dimensionslosen Länge von 3 in Erstarrungsrichtung sowie einer Ausdehnung von 0,1 senkrecht dazu simuliert. Der Mindestabstand der Punkte betrug 0,002, was in einer Punktdichte von 10^5 und damit einer Gesamtmenge von 30000 Punkten entspricht. Die Randbedingungen waren periodisch an den langen Seiten, sowie vom Neumann-Typ mit Fluss Null an den kurzen Seiten. Als Modellsystem kam Aluminium-Kupfer mit einer Ausgangskonzentration von $C_0 = 2\text{Gew}\%$ und einem linearisierten Phasendiagramm mit dem Verteilungskoeffizienten $k = 0,14$ zur Anwendung. Der Diffusionskoeffizient im Flüssigen wurde dimensionslos zu eins gesetzt. Der Temperaturgradient war $dT/dx = 3,1304K$ und bewegte sich mit einer dimensionslosen Geschwindigkeit von 20.

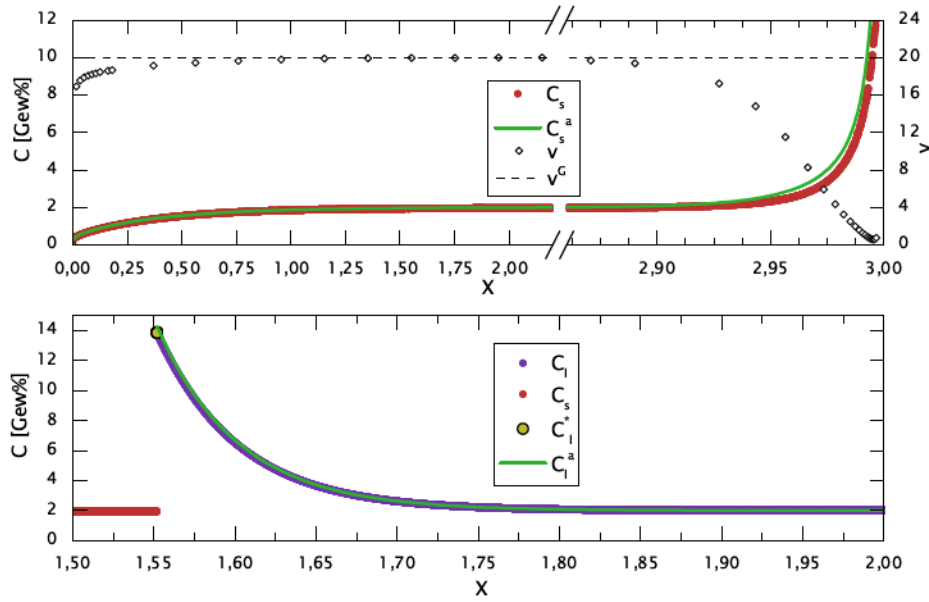


Abbildung 4.10.: Ergebnisse der Simulation gerichteter Erstarrung: Oben: *Linke Achse*. Simulierte Konzentrationsverteilung der erstarrten Domäne (rot) im Vergleich mit der analytischen Lösung C_s^a (grün); *Rechte Achse*: Vergleich der simulierten Geschwindigkeit der Grenzfläche (*offene Symbole*) im Vergleich mit der Geschwindigkeit des Temperaturgradienten v^G (*gestrichelt*); unten: simulierte Konzentrationsverteilung in der Schmelze (*blau*) vor der Grenzfläche während des stationären Zustandes im Vergleich mit der analytischen Lösung (*grün*). Der *gelbe* Punkt markiert die Grenzflächenkonzentration

Neumann-Randbedingungen

Bei Randpunkten mit Neumann-Randbedingungen muss das Konzentrationsfeld am Rand neben der Diffusionsgleichung auch eine Differentialgleichung für die Randbedingung erfüllen:

$$\vec{n} \cdot \vec{\nabla} C \Big|_N = q \quad (4.9)$$

Hier ist \vec{n} die lokale Normalenrichtung des Domänenrandes und q eine Funktion des Ortes und der Zeit, die die Randbedingung beschreibt. In die Tangentialrichtung muss das Konzentrationsfeld jedoch die Diffusionsgleichung erfüllen. Um diese beiden Differentialgleichungen erfüllen zu können, wurde in dieser Arbeit ein neuer Ansatz entwickelt: Dazu wurden an den Randpunkten die linearen Terme der verwendeten monomischen Basis der diffusen Approximation so verändert, dass die Randbedingung immer erfüllt ist: Wird die kleinste-Quadrate-Anpassung der diffusen Approximation im lokalen Koordinatensystem des Punktes konstruiert, gehen in den Gradienten lediglich die Koeffizienten zu den

linearen monomischen Basisfunktionen ein. Daher wurden anstatt der eigentlichen Basisfunktionen x und y die linearen Basisfunktionen im System der Normalenrichtung $n_x x + n_y y$ und $n_y x - n_x y$ gewählt. Der Parameter für die erste Basisfunktion wird auf q festgelegt und lediglich der Parameter für die zweite Basisfunktion, welcher die freie Komponente tangential zum Domänenrand beschreibt, in der diffusen Approximation angepasst. Dann ist die Randbedingung unabhängig von den angepassten Parametern immer erfüllt.

Ergebnisse

Der Vergleich der Simulationsergebnisse mit den verfügbaren analytischen Lösungen ist in Abbildung 4.10 gezeigt. Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung der simulierten Konzentrationsprofile mit den analytischen Lösungen. Geringe Abweichungen treten lediglich im Bereich des finalen Übergangs auf.

4.3.4. Stabile Grenzflächen in 2D: Erstarrung in einer quadratischen Form

Problembeschreibung

Zur Untersuchung der Qualität der Simulation stabiler gekrümmter Grenzflächen wurde die nach innen gerichtete Erstarrung in einer quadratischen Form simuliert. Diese ist zu Beginn mit einer Flüssigkeit an deren Schmelzpunkt gefüllt, während die Ränder der Form eine konstante Temperatur unterhalb des Schmelzpunktes besitzen. Dieses Problem besitzt keine analytische Lösung, wurde jedoch mehrfach in der Literatur simuliert. Die erste Lösung erfolgte mit einer Relaxationsmethode [97], später wurden z.B. auch Randelement- [98, 99] und Finite-Elemente-Methoden [100] angewendet. Die Parameter des Problems wurden [100] entnommen. Der Parameter des verwendeten groben Gitters war $\Delta d = 3,162 \cdot 10^{-3}$, was einem Gitter mit 40000 Punkten entspricht.

Um einen hinreichend stetigen Startzustand für die Simulation zu erhalten, wurde diese mit der analytischen Lösung für das semiinfinite Problem [101] (eine offene Ecke statt eines quadratischen geschlossenen Behälters) initialisiert. Dessen Zeitparameter wurde dabei so gewählt, dass die Grenzfläche einen Abstand von 0,1 und damit mindestens drei Nachbar-

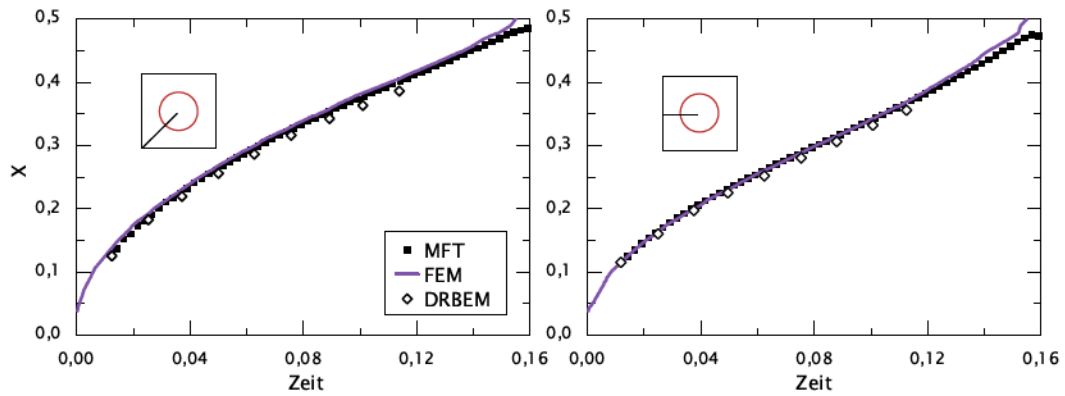


Abbildung 4.11.: Position der Grenzfläche entlang zweier verschiedener Adiabaten. *Links:* Adiabate $x = y$ (siehe eingebettete Schemata), *rechts:* Adiabate $y = 0,5$, jeweils im Vergleich mit den Ergebnissen aus [100] (FEM) und [99] (DRBEM).

schaftsradien zur Domänenwand besaß.

Ergebnisse

Der simulierte Verlauf der Grenzflächen zu verschiedenen Zeiten ist in Abbildung 4.12 dargestellt. Des Weiteren ist in Abbildung 4.11 die Grenzflächenposition entlang der adiabatischen Symmetrielinien $x = y$ und $y = 0,5$ im Verlauf der Zeit gezeigt. Während sich insgesamt eine gute Übereinstimmung mit den publizierten Ergebnissen zeigt, weist die gitterlose Methode in späten Stadien mit stark gekrümmter Grenzfläche sogar im Vergleich zu FEM eine bessere Qualität der Grenzflächenrepräsentation auf.

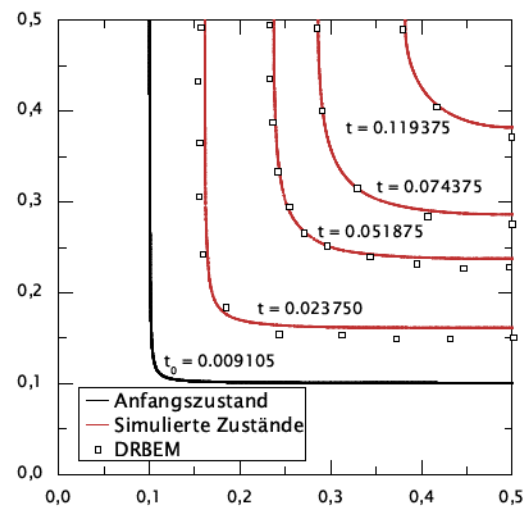


Abbildung 4.12.: Verlauf der Grenzfläche zu verschiedenen Zeitpunkten im Vergleich mit den Ergebnissen aus [99].

4.3.5. Instabile Grenzflächen - dendritische Erstarrung

Die Erstarrung instabiler Grenzflächen wurde anhand des Problems dendritischer Erstarrung in einer unterkühlten Schmelze simuliert. Als Modellsystem wurde wiederum eine

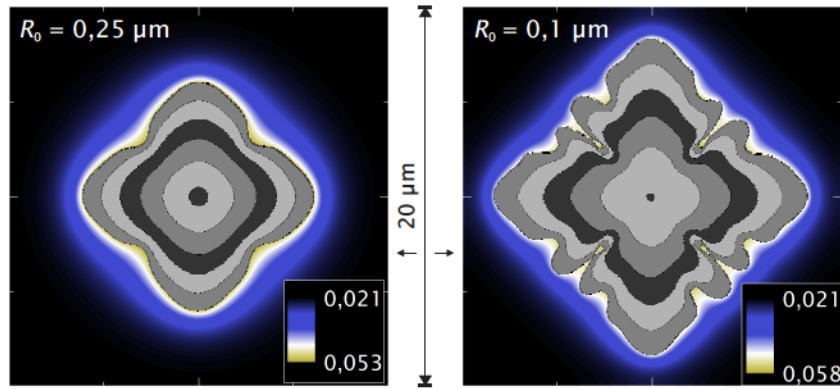


Abbildung 4.13.: Simulierte dendritische Erstarrung bei einer Unterkühlung von 8K mit unterschiedlichem Auflösungsvermögen (R_0 : Radius der Interpolationsdomäne); Erster gezeigter Zustand ist der Startkeim mit Radius $2R_0$, darauf folgende Zustände sind im Abstand von 0,3ms gezeigt.

niedrig legierte Aluminium-Kupfer-Schmelze mit linearisiertem Phasendiagramm gewählt. Die Schmelztemperatur reinen Aluminiums beträgt 933,47K, der Anstieg der Liquiduslinie $m = -2.6\text{K/Gew\%}$ und der Verteilungskoeffizient $k = 0,14$. Die Diffusionskoeffizienten von Kupfer in Aluminium betragen $D_l = 3,0 \cdot 10^{-9}\text{m}^2/\text{s}$ in der Schmelze sowie $D_s = 3,0 \cdot 10^{-13}\text{m}^2/\text{s}$ im Festkörper. Für die Simulation instabiler Grenzflächen wurden ausschließlich volle Gitter eingesetzt.

In eine Schmelze mit einer Kupferkonzentration von 2,104Gew% (Gleichgewichtskonzentration einer planen Grenzfläche bei 928K) wurde ein kreisförmiger Keim eingesetzt. Danach wurde die gesamte Domäne instantan auf eine vorgegebene Temperatur abgekühlt. Da das gitterlose Interpolationsverfahren unstetige Konzentrationsfelder nur mit großen Fehlern interpolieren kann, wurde ein stetiger Übergang zwischen der Konzentration in der Schmelze und der Grenzflächenkonzentration des Keims (Gleichgewichtskonzentration bei der gegebenen Unterkühlung) auf einer hinreichend kleinen Längenskala ($5R_0 = 25\Delta d$) eingesetzt.

Einfluss der Gitterauflösung

Das Frühstadium des Wachstums eines gleichachsigen Dendriten in eine Schmelze von 8K wurde mit zwei verschiedenen Gitterauflösungen simuliert. Dabei betrugen die Mindestabstände Δd der Punkte $0,02\mu\text{m}$ und $0,05\mu\text{m}$, was einem Nachbarschaftsradius R_0 , welcher

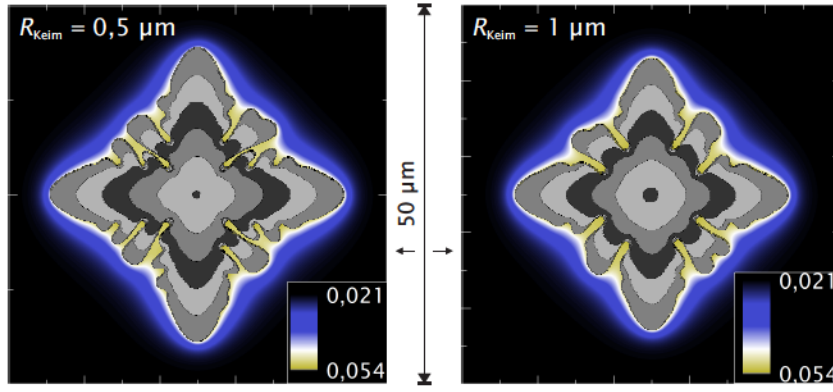


Abbildung 4.14.: Simulierte dendritische Erstarrung bei einer Unterkühlung von 8K bei einer konstanten Gitterauflösung $R_0 = 0,25\mu\text{m}$ mit unterschiedlichem Keimradius R_{Keim} (erster gezeigter Zustand). Zeitlicher Abstand der Zustände 1,2ms.

die Ortsauflösung der Methode angibt, von $0,1\mu\text{m}$ und $0,25\mu\text{m}$ entspricht. Der Radius des Startkeims betrug jeweils $2R_0$.

Ergebnisse dieser Simulationen sind in Abbildung 4.13 gezeigt. Mit beiden Gitterauflösungen kann das instabilwerden der Grenzfläche beobachtet werden. Allerdings zeigt sich bei der höheren Gitterauflösung eine etwas schnellere Wachstumsgeschwindigkeit, die mit einem früherem Instabilwerden der Grenzfläche einhergeht. Während sich bei der groben Auflösung gerade erst Primärarme ausbilden, erscheinen bei der feinen Gitterauflösung bereits Sekundärarme. Diese treten sehr früh an den Flanken der Primärspitzen auf und wachsen in $\langle 11 \rangle$ -Richtungen.

Einfluss der Keimgröße

Mit der gröberen Auflösung von $R_0 = 0,25\mu\text{m}$ wurden gleichachsige Dendriten mit unterschiedlichem Keimradius simuliert. Die Ergebnisse dieser Simulationen sind in Abbildung 4.14 gezeigt. Die Simulation mit einem Keimradius von $0,5\mu\text{m}$ stellt dabei eine Fortführung der Simulation in Abbildung 4.13 (rechts) dar. Es ist zu sehen, dass auch diese Simulation nach dem Instabilwerden der Grenzfläche vierzählige Primärarme mit Sekundärarmen in $\langle 11 \rangle$ -Richtungen ausbildet. Bei der Simulation mit dem größeren Keim bilden sich hingegen zunächst keine Primärarme mit daraus hervorgehenden Sekundärarmen. Stattdessen entstehen kleinere Primärarme in $\langle 11 \rangle$ -Richtungen, noch bevor die Grenzfläche eine kon-

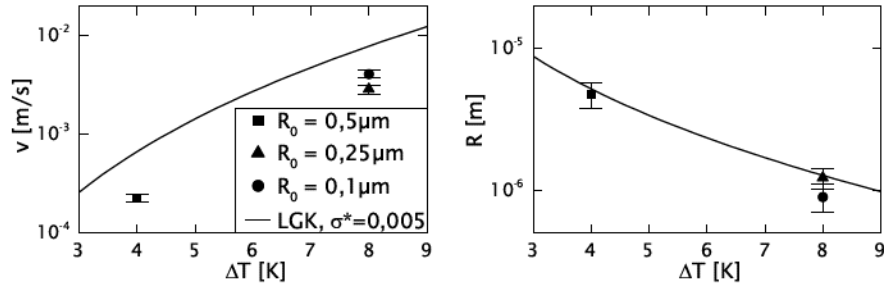


Abbildung 4.15.: Gleichgewichts-Wachstumsgeschwindigkeiten und -Radien für unterschiedliche Unterkühlungen und Gitterauflösungen im Vergleich mit dem analytischen Modell [21] (durchgezogen).

kave Form annehmen kann.

Quantitative Analyse

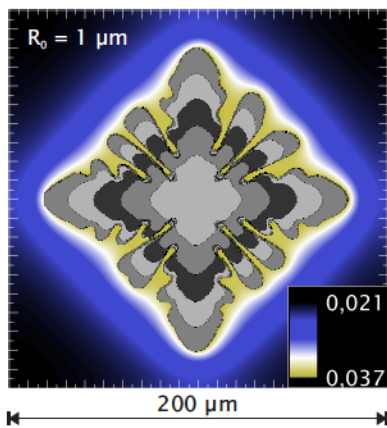


Abbildung 4.16.: Simuliertes dendritisches Wachstum bei einer Unterkühlung von 4K, abgebildete Zustände im zeitlichen Abstand von 60ms.

Es wurde eine weitere Simulation mit einer geringeren Unterkühlung von 4K durchgeführt. Der Mindestabstand der Gitterpunkte betrug bei dieser Simulation $0,2\mu\text{m}$, entsprechend einem Nachbarschaftsradius von $1\mu\text{m}$. Der Startkeim besaß ebenfalls einen Radius von $1\mu\text{m}$. Der Wachstumsverlauf ist in Abbildung 4.16 gezeigt. Auch bei dieser Simulation treten an den Seiten der Primärarme wieder Sekundärarme in $\langle 11 \rangle$ -Richtungen auf.

Von dieser Simulation, sowie von den beiden 8K-Simulation mit Gitterauflösungen $R_0 = 0,5\mu\text{m}$ und $0,25\mu\text{m}$ wurden die Gleichgewichtsgeschwindigkeiten sowie der Krümmungsradius der vier Spitzen im Verlauf der Simulation zu ausgewählten Zeitpunkten ausgewertet. Da insbesondere die Spitzenradien im Verlauf der Simulation größere Schwankungen aufwiesen wurde der Verlauf der Radien und der Geschwindigkeiten während der durch eine exponentielle Funktion $a_0 + a_1 e^{a_2 t}$ angepasst (mit $a_2 < 0$). In Abbildung 4.15 sind die Asymptoten a_0 dieser angepassten Funktion gezeigt. Der Fehler wurde anhand der Qualität der Anpassung bei den Geschwindigkeiten zu 10% geschätzt, bei den Radien zu 20%.

Beim Vergleich der extrapolierten Gleichgewichtswerte mit dem analytischen Modell [21] (Abbildung 4.15) zeigt sich, dass trotz recht guter Übereinstimmung beim Spitzenradius die simulierte Wachstumsgeschwindigkeit konsequent knapp eine halbe Größenordnung unterhalb der analytischen liegt. Bei den 8K-Simulationen zeigt die Simulation mit größerem Gitter eine bessere Anpassung des Spitzenradius an das analytische Modell als die Simulation mit feinerem Gitter. Im Gegenzug ist bei letzterer die Abweichung in der Geschwindigkeit etwas geringer.

4.4. Diskussion

Obwohl im Testfall der eindimensionalen Diffusion alle Interpolationsverfahren mit vereinfachter Kollokation im betrachteten Bereich bis 50000 Simulationsschritte ein nur langsam wachsendes bzw. sogar sinkendes Fehlerniveau zeigten, trat bei der zweidimensionalen Diffusionssimulation ohne Glättung dennoch divergierendes Verhalten auf. Dabei stieg der Fehler über den Verlauf der Simulation exponentiell an (Abbildung 4.9).

Da jeder Zeitschritt im Prinzip einer Multiplikation des Simulationszustandes \mathbf{u} mit der zeitlich unveränderlichen, lediglich von der Gitteranordnung abhängigen Matrix U (Gleichung (4.7)) entspricht, so muss der wachsende Fehler aus der numerischen Repräsentation dieser Matrix und des Zustandes herrühren: Durch die numerische Darstellung endlicher Genauigkeit besitzt die numerische Repräsentation U^{rep} kleine Abweichungen:

$$U^{\text{rep}} = U + \delta U \quad (4.10)$$

Ein Zeitschritt Δt besteht nun im Wesentlichen aus der Multiplikation des Zustandes \mathbf{u}^t mit U . Gleichzeitig können auch die neuen Punktwerte $\mathbf{u}^{t+\Delta t}$ lediglich mit einer endlichen Genauigkeit gespeichert werden, was wiederum einen kleinen Fehler $\delta \mathbf{u}^t$ erzeugt. Ein numerisch ausgeführter Zeitschritt hat also die Form:

$$\mathbf{u}^{t+\Delta t, \text{rep}} = (U + \delta U) \mathbf{u}^{t, (\text{rep})} + \delta \mathbf{u}^{t+\Delta t} \quad (4.11)$$

Diese Gleichung beschreibt den gesamten numerischen Zeitschrittoperator U^{num} . $\delta \mathbf{u}$ ist

dabei in jedem Zeitschritt unterschiedlich und sehr klein. Über dessen Auswirkung kann keine gesicherte Aussage getroffen werden, es wird jedoch im Allgemeinen (bei allen Simulationsmethoden) davon ausgegangen, dass dieser Fehler klein ist. Der Darstellungsfehler der Matrix δU ist hingegen konstant.

Ist nun dieser Repräsentationsfehler der Matrix größer als der numerische Fehler δu , so wird er in jedem Zeitschritt eine gleichmäßige Wirkung auf die Simulation haben. Da diese Wirkung multiplikativer Natur ist (er wird mit den Punktwerten multipliziert), erzeugt er auf diese Weise einen exponentiell wachsenden Simulationsfehler. Bei wiederholter Anwendung des Zeitschrittoperators äußert sich dieses Verhalten im Erscheinen von Matrixprodukten $U^n \delta U^m$ mit in jedem Schritt steigenden Potenzen n, m . Die Größe dieses Produktes bestimmt die Stärke des Fehlers. Die Einführung eines nichtverschwindenden Glättungsparameters η (der insbesondere die Diagonalterme von U beeinflusst) scheint den Wert dieses Produktes wieder unter die Rauschschwelle zu senken, sodass das exponentielle Fehlerwachstum verschwindet.

Bei in der Literatur verwendeten regelmäßigen Punktgittern (wie z.B. kartesischen Gittern) spielt dieser Effekt keine Rolle, da alle auftretenden Matrizen (Formfunktionen, Ableitungen) im Allgemeinen in rationalen Zahlen und damit meist auch numerisch exakt darstellbar sind.

Für die räumliche Konvergenz zeigt sich hingegen wie erwartet und in der Literatur dokumentiert ein quadratisches Verhalten, was auf die Verwendung der monomischen Basis zweiter Ordnung zurückzuführen ist. Selbst die Interpolation ohne Glättung zeigt dieses Verhalten bei geringen Punktdichten. Bei großen Punktdichten sinkt hingegen die Größe des Zeitschrittes, sodass für dieselbe Simulation mehr Zeitschritte notwendig sind, was bei sehr großen Punktdichten den oben diskutierten exponentiell mit der Zeit wachsenden Fehler dominant werden lässt.

Die durchgeführte Simulation gerichteter Erstarrung belegt die Qualität der Kopplung der Grenzflächenbewegung an das Konzentrationsfeld. Neben dem Konzentrationsprofil vor der Grenzfläche im Gleichgewichtszustand entspricht auch die Konzentration des erstarrenden Festkörpers fast über die gesamte Probenlänge hinweg der analytischen Lösung. Lediglich im finalen Bereich zeigen sich Abweichungen, die allerdings durch die ein-

schränkenden Annahmen im analytischen Modell erklärt werden können. Bei diesem wird angenommen, dass sich die Grenzfläche mit konstanter Geschwindigkeit durch die Probe bewegt. Tatsächlich bewirkt aber der Aufstau an Legierungsatomen zum Probenende hin eine Verlangsamung der Grenzfläche. Dies führt dazu, dass der Konzentrationsgradient vor der Grenzfläche während deren Bewegung stärker abgebaut werden kann, was in niedrigeren erstarrenden Konzentrationen resultiert.

Die Simulation nach innen gerichteter Erstarrung in einer quadratischen Form bestätigt die Qualität der Repräsentation stabiler Grenzflächenbewegungen. Dies wird beim Vergleich der Grenzflächenform mit veröffentlichten Ergebnissen deutlich, ebenso bei der quantitativen Analyse der Grenzflächenposition entlang der Adiabaten. Bei diesen zeigt sich sogar eine Überlegenheit der gitterlosen Methode bei späten Zuständen mit kleinen Volumina an Restschmelze und damit stark gekrümmten Grenzflächen. So bleibt die Methode wesentlich länger stabil und zeigt erst ganz zum Ende hin fluktuierendes Verhalten, welches bei der zum Vergleich herangezogenen FEM-Simulation schon wesentlich eher auftritt.

Die Simulation instabiler Grenzflächen stellt erwartungsgemäß die größte Herausforderung für die Methode dar. Die Wahl der Gitterauflösung spielt dabei eine große Rolle für die Qualität des Simulationsergebnisses, wie an der Simulationsreihe mit einer Unterkühlung von 8K zu sehen ist. Obwohl mit beiden Gitterauflösungen das korrekte Auftreten der vierzähligen Instabilität der Grenzfläche beobachtbar ist, so tritt dies bei der höheren Auflösung wesentlich früher auf. Dies ist zum Einen der Gitterauflösung geschuldet: So treten flüssige Kanäle zwischen den Armen auf, deren Dicke mit der größeren Gitterauflösung nicht mehr aufgelöst werden könnten. Gleichzeitig erlaubte die höher aufgelöste Simulation auch einen kleineren Keim zu Simulationsbeginn, was den beobachteten Effekt erklären kann.

Bei Simulation mit größeren Zeit- und Längenskalen zeigen sich erste Sekundärarme. Während sich diese bei der hochaufgelösten Simulation schon auf kleinen Längenskalen andeuteten, treten sie bei der nieder aufgelösten Simulation erst bei größeren Zeit- und Längenskalen in Erscheinung. Auffällig ist ihr Wachstum in $\langle 11 \rangle$ -Richtung. Dieses wird durch die Nähe der Primärarme und den Einfluss deren Konzentrationsfelder hervorgeru-

fen. Bei der Simulation mit der geringeren Unterkühlung von 4K, die ähnliches Sekundärarmwachstum zeigt, ist jedoch zu erkennen, dass diese Sekundärarme nach Wegfall der geometrischen Beschränkung die Bestrebung zeigen, in der physikalisch korrekten $\langle 10 \rangle$ -Richtung zu wachsen. So richten in Abbildung 4.16 die beiden Sekundärarme rechts oben ihre Spitzen im letzten gezeigten Zustand wieder deutlich in $\langle 10 \rangle$ -Richtung aus. Ebenso zeigt sich an dem dominierenden Sekundärarm auf der ihnen gegenüberliegenden Seite eine beginnende Aufspaltung in zwei Spitzen mit korrekter Ausrichtung.

Berechnet man mittels der Perturbationstheorie von Mullins und Sekerka [102] den kritischen Keimradius für das auftreten einer vierzähligen Instabilität, so erhält man einen Wert von $0,96\mu\text{m}$. Wird nun in der Simulation der Anfangskeim größer gewählt, so bricht in der Simulation die Vierzähligkeit zusammen. Dies hängt mit den gewählten Anfangsbedingungen und dem vorgegebenen Konzentrationsfeld zusammen, durch das sich die korrekte Kopplung von Wachstum und Konzentrationsfeld erst einstellen muss. Liegt der Radius des erstarrten Festkörpers bei Erreichen dieses ersten “physikalischen” Zustandes noch unterhalb des kritischen Keimradius für die Instabilität, so kann sich diese korrekt ausbilden. Liegt er zu diesem Zeitpunkt schon über dem kritischen Radius, so bildet sich die Instabilität nicht korrekt heraus. Stattdessen entstehen, noch bevor sich eine konkave Grenzflächenkrümmung einstellen kann, sekundäre Instabilitäten in $\langle 11 \rangle$ -Richtungen. Obwohl diese sekundären Instabilitäten Ähnlichkeiten mit den Sekundärarmen des aus dem kleineren Keim erwachsenen Dendriten aufweisen, so sind sie doch von grundlegend anderer Natur. Während die Sekundärarme bei kleinerer Keimgröße aus den Flanken der Dendritenspitze erwachsen, und somit echte Sekundärarme darstellen, fußen die sekundären Instabilitäten als unphysikalisches Resultat des zu groben Anfangszustandes direkt auf dem Primärkeim.

Beim Vergleich der Wachstumscharakteristika mit dem analytischen Modell zeigt sich, dass das Modell die Dendritenspitze mit recht guter Genauigkeit abbilden kann. Gleichzeitig liegen die simulierten Geschwindigkeiten allerdings unterhalb der analytisch vorhergesagten Werte. Dies kann mit den früh auftretenden Sekundärarmen begründet werden: Das analytische Modell geht von parabelförmigen Isokonzentrationslinien parallel zur Dendritenspitze aus. Durch die nahegelegenen Spitzen der Sekundärarme gilt dies jedoch nur in

einem relativ kleinen Bereich um die Primärarmspitze herum. Anders ausgedrückt behindern sich Primär- und Sekundärarm durch die Überlappung ihrer Konzentrationsfelder gegenseitig, was zu dem beobachteten langsameren Wachstum führt. Weiterhin interessant ist, dass die mit gröberer Auflösung simulierte Dendritenspitze einen besser an die Theorie angepassten Spitzenradius zeigt als diejenige, die mit feinerer Gitterauflösung simuliert wurde, während ihre Geschwindigkeit hingegen noch geringer ist.

Das auffallendste Merkmal der Simulationen, das frühe Auftreten der Sekundärarme, wurde bis jetzt von keiner anderen Simulationsmethode beobachtet. Dies lässt zwei mögliche Interpretationen zu:

Einerseits könnte das frühe Sekundärarmwachstum auf einen unphysikalischen Effekt im Modell zurückgeführt werden. Dabei ist das Rauschniveau allein nicht ausreichend, um solch einen regelmäßigen Effekt hervorzurufen. Vielmehr muss ein bis hierher nicht identifizierter systematischer Effekt im Modell existieren, der die Entstehung dieser Sekundärarme fördert. Umgekehrt müssten in diesem Fall in der Realität Effekte auftreten, welche die Sekundärarmbildung an dieser Stelle unterdrücken, die im Modell jedoch nur ungenügend repräsentiert werden. Eine Möglichkeit dafür wären (Diffusions-)Effekte auf Längenskalen unterhalb der Auflösungsgrenze R_0 . Sofern diese eine endlich kleine Wellenlänge haben, sollte durch weitere Vergrößerung der Gitterauflösung das frühe Sekundärarmwachstum verschwinden. Gleichzeitig wäre damit eine systematische Untersuchung dieser Effekte möglich.

Andererseits könnte das Modell tatsächlich physikalische zweidimensionale Realität abbilden. Die Tatsache, dass andere numerische Methoden diesen Effekt nicht zeigten, hängt auch damit zusammen, dass in den etablierten Methoden das Sekundärarmwachstum bekanntermaßen eher gehemmt ist, sodass meist zusätzliche Maßnahmen (zum Beispiel künstlichen Rauschen) unternommen werden, um Sekundärarmwachstum hervorzurufen. Experimentell ist dieses Phänomen hingegen fast unmöglich nachzuweisen, da dazu eine in-situ-Beobachtung eines (quasi) zweidimensionalen erstarrenden gleichachsigen Dendriten notwendig wäre. Alternativ müssten diese frühen Sekundärarme bei einer dreidimensionalen Simulation verschwinden. Aufgrund des zusätzlichen Vorhandenseins einer konvexen Krümmung an der Position ihrer jetzigen Wurzel ist dieser Effekt auch vorstellbar.

Dafür wäre allerdings eine Erweiterung des Modells auf drei Dimensionen, inklusive der dafür erforderlichen Anbindung an ein MPI für verteilte Rechnungen notwendig, ist aber nicht mehr Teil dieser Arbeit.

Insgesamt konnte gezeigt werden, dass die Lösung von partiellen Differentialgleichungen auf einem anisotropiefreien Gitter möglich ist, ebenso die Kopplung an eine (stabile) Grenzfläche. Deren Bewegung weist im Gegensatz zu den etablierten Methoden keine systematische Richtungsabhängigkeit auf. Ebenso kann im Prinzip das Verhalten instabiler Grenzflächen simuliert werden, wobei für eine genaue Interpretation dieser Simulationen weitere numerische Versuche notwendig sind.

5. Vergleich der Methoden

In Abbildung 5.1 sind repräsentative Ergebnisse beider Methoden gezeigt. Im qualitativen Vergleich zeigen sich dabei die Unterschiede der Methoden. Der mittels MFT simulierte Dendrit besitzt gegenüber den mittels ZA simulierten eine deutlich breitere Form der Dendritenspitze. Dafür treten die Sekundärarme bei diesem wesentlich früher auf, und besitzen durch den Einfluss der nahegelegenen Primärarme eine Ausrichtung in $\langle 11 \rangle$ -Richtungen. Die ZA-Dendriten zeigen hingegen eine Abhängigkeit der Wachstumsgeschwindigkeit von ihrer Ausrichtung relativ zum Simulationsgitter. Insgesamt bewegen sich die simulierten Wachstumsgeschwindigkeiten allerdings in vergleichbaren Bereichen.

Die Unterschiede der Methoden lassen sich auch durch eine qualitative “Frequenzanalyse” der durch die Methoden eingebrachten Fehler diskutieren. So zeigen zelluläre Automaten eine starke Beeinflussung durch die diskreten Raumfrequenzen, die durch das Gitter vorgegeben werden. Diese wirken zu allererst auf die Repräsentation der Grenzfläche. Durch die in dieser Arbeit eingeführten Modifikationen konnten diese Raumfrequenzen signifikant abgeschwächt werden. Durch Darstellung der Grenzfläche über eine größere Menge von Zellen, wie sie in der Phasenfeldmethode geschieht, kann dieses Rauschen ebenfalls gedämpft werden.

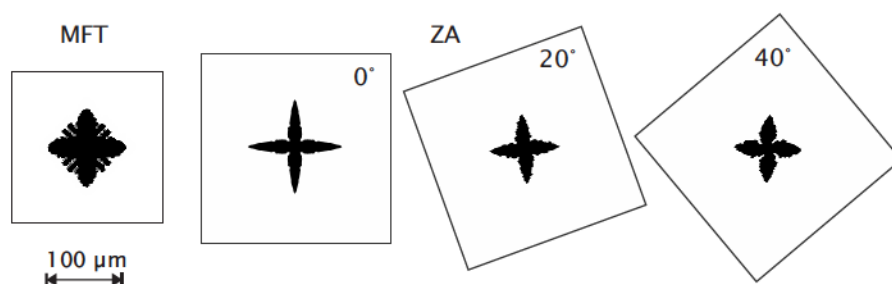


Abbildung 5.1.: Simuliertes Dendritenwachstum in Al-Cu bei einer konstanten Abkühlrate von 50K/s nach 150ms.

Bei der gitterlosen Simulation auf einem anisotropiefreien Gitter existieren hingegen keine bevorzugten Raumfrequenzen, der Einfluss des Gitters auf die Simulation ist also isotrop. Gleichzeitig besitzt allerdings das numerische Rauschen eine wesentlich größere Amplitude, die bei den vorliegenden Simulationen das beobachtete frühe Auftreten von Sekundärarmen hervorruft. Ob dieses tatsächlich physikalisch sinnvoll ist, kann derzeit nicht entschieden werden.

Derzeit besitzt das gitterlose Modell einen Rechenzeitbedarf, der etwas mehr als zwei Größenordnungen oberhalb dem der Zelluläre-Automaten-Rechnungen liegt. Gleichzeitig ist allerdings bei diesem auch noch Raum für Optimierungen, sowohl in der Implementierung als auch bei den Simulationsparametern. So besitzen bei der gegenwärtigen Wahl der Nachbarschaftsgröße Gitterpunkte im Schnitt um die 50 Nachbarn, was in bis zu mehreren Hundert Partikeln bei jeder Berechnung, die die Grenzfläche beinhaltet, resultiert. Mit der Verringerung dieser Anzahlen ist eine signifikante Reduktion der Rechenzeit möglich.

6. Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurden zwei unterschiedliche Methoden zur Erstarrungssimulation insbesondere für dendritische Erstarrung entwickelt. Während bei der Zellulären Automaten-Methode vor allem die Verringerung der Gitteranisotropie im Vordergrund stand, wurde die anisotropiefreie “Meshless Front Tracking”-Methode von Grund auf, basierend auf der relativ jungen Klasse der gitterlosen Methoden, entwickelt.

Bei der Zellulären Automaten-Methode konnten nach einer systematischen Überprüfung verschiedener Methoden aus der Literatur zwei mögliche fehlerarme Methoden zur Krümmungsberechnung gefunden werden, von denen sich in der Anwendung die Höhenfunktion als bestmögliche Methode herausstellte. Zusätzlich wurde eine Methode zur Anisotropiekorrektur gefunden, die es ermöglichte, Dendritenwachstum auch außerhalb der Gitterrichtung in qualitativ zufriedenstellender Weise zu simulieren. Dabei gelang es jedoch nicht, den Gittereinfluss so weit zu eliminieren, dass quantitative Auswertungen (unabhängig von der Wachstumsrichtung des Dendriten) ermöglicht würden. Auch durch den Ansatz der zeitlich gemittelten Anisotropie durch Gitterrotation ließen sich keine qualitativ besseren Ergebnisse erzielen.

Bei der gitterlosen Simulationsmethode wurde durch eine systematische Untersuchung eine Kombination aus gitterloser Interpolationsmethode und Integrationsmethode gefunden, die auch auf einem zufälligen Gitter numerisch stabile Simulationen ermöglicht. Dies waren die Interpolationsmethode der Diffusen Approximation, sowie eine vereinfachte Kollokation zur Integration der Diffusionsgleichung. Die Eigenschaften dieser Methode wurden anhand eines beispielhaften zweidimensionalen Diffusionsproblems untersucht.

Als Grenzflächenrepräsentation wurde eine Partikelmethode gewählt. Aufgrund der neuartigen Repräsentation des Raumes durch Punkte konnten klassische Partikelmethoden

dabei nicht angewandt werden, vielmehr musste eine vollständig neuartige Methode aufgebaut werden. Die dabei zu lösenden Problemstellungen waren vor allem die Berechnung der Grenzflächengeometrie sowie die korrekte Phasenzuordnung der Punkte der zugrundeliegenden Gitterpunkte. Diese “Meshless Front Tracking”-Methode wurde zunächst mittels zwei bekannter Probleme validiert und dann zur Berechnung von Erstarrungsproblemen mit instabiler Grenzfläche eingesetzt. Dabei zeigte sich die prinzipielle Eignung der Methode zur Darstellung instabiler Grenzflächen. So schlug sich die vorgegebene Vierzähligkeit und Ausrichtung der Grenzflächenenergieanisotropie korrekt in allen Ergebnissen nieder. Gleichzeitig wurde ein frühes Ansetzen des Sekundärarmwachstums gefunden, welches in dieser Form noch mit keiner anderen Simulationsmethode gefunden wurde.

Insgesamt konnte die Zelluläre Automaten-Methode hingegen noch einmal entscheidend gegenüber den veröffentlichten Modellen verbessert werden. Eine vollständige Unabhängigkeit des Simulationsergebnisses von der Gitterrichtung erscheint zwar immer noch möglich, allerdings wäre dazu ein nicht mehr sinnvoller Aufwand zu treiben, der wohl effektiver zur Weiterentwicklung anderer Modelle eingesetzt werden könnte. Das gitterlose Modell liefert hingegen vielversprechende Ergebnisse, die im Moment nur durch den Rechenzeitbedarf begrenzt werden.

Literaturverzeichnis

- [1] Smith, Jeffrey B.: *Shape Instabilities and Pattern Formation in Solidification: A New Method for Numerical Solution of the Moving Boundary Problem*. Journal of Computational Physics, 39(1):112–127, 1981.
- [2] Umantsev, A. R., V. V. Vinogradov und V. T. Borisov: *Mathematical-Modeling of Dendritic Growth in Supercooled Melt*. Kristallografiya, 30(3):455–460, 1985.
- [3] Schönfisch, B.: *Anisotropy in Cellular Automata*. Biosystems, 41(1):29–41, 1997.
- [4] Markus, M.: *Dynamics of a Cellular Automaton with Randomly Distributed Elements*, Band 131 der Reihe *Mathematical Population Dynamics: Proceedings of the Second International Conference*. Marcel Dekker, New York, 1991.
- [5] Lorbiecka, A. Z. und B. Šarler: *Simulation of Dendritic Growth with Different Orientation by Using the Point Automata Method*. CMC - Computers Materials & Continua, 18(1):69–103, 2010.
- [6] Beltran-Sanchez, L. und D. M. Stefanescu: *A Quantitative Dendrite Growth Model and Analysis of Stability Concepts*. Metallurgical and Materials Transactions A, 35A(8):2471–2485, 2004.
- [7] Wei, L., X. Lin, M. Wang und W. Huang: *Orientation Selection of Equiaxed Dendritic Growth by Three-Dimensional Cellular Automaton Model*. Physica B, 407(13):2471–2475, 2012.
- [8] Krane, M. J. M., D. R. Johnson und S. Raghavan: *The Development of a Cellular Automaton-Finite Volume Model for Dendritic Growth*. Applied Mathematical Modelling, 33(5):2234–2247, 2009.

- [9] Bösch, A., H. Müller-Krumbhaar und O. Shochet: *Phase-Field Models for Moving Boundary-Problems - Controlling Metastability and Anisotropy*. Zeitschrift für Physik B, 97(2):367–377, 1995.
- [10] Dilthey, U., V. Pavlik und T. Reichel: *Mathematical Modelling of Weld Phenomena* 3, Kapitel 5, Seiten 85–105. Materials Modelling Series. The Institute of Metals, London, 1. Auflage, 1997.
- [11] Nastac, L.: *Numerical Modeling of Solidification Morphologies and Segregation Patterns in Cast Dendritic Alloys*. Acta Materialia, 47(17):4253–4262, 1999.
- [12] Wang, W., P. D. Lee und M. McLean: *A Model of Solidification Microstructures in Nickel-Based Superalloys: Predicting Primary Dendrite Spacing Selection*. Acta Materialia, 51(10):2971–2987, 2003.
- [13] Nakagawa, M., Y. Natsume und K. Ohsasa: *Dendrite Growth Model Using Front Tracking Technique with New Growth Algorithm*. Isij International, 46(6):909–913, 2006.
- [14] Zhu, M. F. und D. M. Stefanescu: *Virtual Front Tracking Model for the Quantitative Modeling of Dendritic Growth in Solidification of Alloys*. Acta Materialia, 55(5):1741–1755, 2007.
- [15] Sasikumar, R. und R. Sreenivasan: *2-Dimensional Simulation of Dendrite Morphology*. Acta Metallurgica Et Materialia, 42(7):2381–2386, 1994.
- [16] Beltran-Sanchez, L. und D. M. Stefanescu: *Growth of Solutal Dendrites: A Cellular Automaton Model and Its Quantitative Capabilities*. Metallurgical and Materials Transactions A, 34(2):367–382, 2003.
- [17] Li, Q., B. Yu, H. Zhang, R. Li, F. Wang, S. Xie, G. Huang und H. Wang: *Cellular Automaton Modeling of Semi-Solid Microstructure Formation*. China Foundry, 7(2):143–148, 2010.

- [18] Wu, M. W. und S. M. Xiong: *A Three-Dimensional Cellular Automaton Model for Simulation of Dendritic Growth of Magnesium Alloy*. Acta Metallurgica Sinica - English Letters, 25(3):169–178, 2012.
- [19] Rappaz, M. und C. A. Gandin: *Probabilistic Modeling of Microstructure Formation in Solidification Processes*. Acta Metallurgica Et Materialia, 41(2):345–360, 1993.
- [20] Gandin, C. A. und M. Rappaz: *A 3D Cellular Automaton Algorithm for the Prediction of Dendritic Grain Growth*. Acta Materialia, 45(5):2187–2195, 1997.
- [21] Lipton, J., M. E. Glicksman und W. Kurz: *Dendritic Growth into Undercooled Alloy Melts*. Materials Science and Engineering, 65(1):57–63, 1984.
- [22] Zhu, M. F. und C. P. Hong: *A Modified Cellular Automaton Model for the Simulation of Dendritic Growth in Solidification of Alloys*. Isij International, 41(5):436–445, 2001.
- [23] Xu, Q. Y. und B. C. Liu: *Modeling of As-cast Microstructure of Al Alloy with a Modified Cellular Automaton Method*. Materials Transactions, 42(11):2316–2321, 2001.
- [24] Pan, S. und M. Zhu: *A Three-Dimensional Sharp Interface Model for the Quantitative Simulation of Solutal Dendritic Growth*. Acta Materialia, 58(1):340–352, 2010.
- [25] Yin, H., S. D. Felicelli und L. Wang: *Simulation of a Dendritic Microstructure with the Lattice Boltzmann and Cellular Automaton Methods*. Acta Materialia, 59(8):3124–3136, 2011.
- [26] Michelic, Sebastian C., Joerg M. Thuswaldner und Christian Bernhard: *Polydimensional Modelling of Dendritic Growth and Microsegregation in Multicomponent Alloys*. Acta Materialia, 58(7):2738–2751, 2010.
- [27] Sasikumar, R. und E. Jacob: *Simulation of Side Branch Evolution in Thermal Dendritic Grains*. Scripta Materialia, 35(4):505–510, 1996.
- [28] Osher, S. und J. A. Sethian: *Fronts Propagating with Curvature-Dependent Speed - Algorithms Based on Hamilton-Jacobi Formulations*. Journal of Computational Physics, 79(1):12–49, 1988.

- [29] Kothe, D. B., R. C. Mjolsness und M.D. Torrey: *Ripple: A Computer Program for Incompressible Flows with Free Surfaces*, 1991.
- [30] Nichols, B.D., C.W. Hirt und R.S. Hotchkiss: *Sola-VOF: A Solution Algorithm for Transient Fluid Flow with Multiple Free Boundaries*. Technischer Bericht, Los Alamos Scientific Laboratory, 1980.
- [31] Bullard, J. W., E. J. Garboczi, W. C. Carter und E. R. Fuller: *Numerical-Methods for Computing Interfacial Mean-Curvature*. Computational Materials Science, 4(2):103–116, 1995.
- [32] Meier, M., G. Yadigaroglu und B. L. Smith: *A Novel Technique for Including Surface Tension in PLIC-VOF Methods*. European Journal of Mechanics - B/Fluids, 21(1):61–73, 2002.
- [33] Brown, S. G. R. und J. A. Spittle: *Rule-Based Lattice Computer-Models for Simulating Dendritic Growth*. Scripta Metallurgica Et Materialia, 27(11):1599–1603, 1992.
- [34] Kremeyer, K.: *Cellular Automata Investigations of Binary Solidification*. Journal of Computational Physics, 142(1):243–263, 1998.
- [35] Martorano, M. A., M. A. Fortes und A. F. Padilha: *A Numerical Method for Curvature Driven Boundary Migration*. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 14(1):83–98, 2006.
- [36] Jacot, A. und M. Rappaz: *A Pseudo-Front Tracking Technique for the Modelling of Solidification Microstructures in Multi-Component Alloys*. Acta Materialia, 50(8):1909–1926, 2002.
- [37] Tan, W., N. S. Bailey und Y. C. Shin: *A Novel Integrated Model Combining Cellular Automata and Phase Field Methods for Microstructure Evolution During Solidification of Multi-Component and Multi-Phase Alloys*. Computational Materials Science, 50(9):2573–2585, 2011.

- [38] Sussman, M. und E. G. Puckett: *A Coupled Level Set and Volume-of-Fluid Method for Computing 3D and Axisymmetric Incompressible Two-Phase Flows*. Journal of Computational Physics, 162(2):301–337, 2000.
- [39] Taylor, J. E., J. W. Cahn und C. A. Handwerker: *Overview No. 98 I - Geometric Models of Crystal Growth*. Acta Metallurgica Et Materialia, 40(7):1443–1474, 1992.
- [40] Taylor, J. E.: *II - Mean Curvature and Weighted Mean Curvature*. Acta Metallurgica Et Materialia, 40(7):1475–1485, 1992.
- [41] Hoffman, D. W. und J. W. Cahn: *Vector Thermodynamics for Anisotropic Surfaces .1. Fundamentals and Application to Plane Surface Junctions*. Surface Science, 31(1):368–388, 1972.
- [42] Cahn, J. W. und D. W. Hoffman: *Vector Thermodynamics for Anisotropic Surfaces .2. Curved and Faceted Surfaces*. Acta Metallurgica, 22(10):1205–1214, 1974.
- [43] Cummins, S. J., M. M. Francois und D. B. Kothe: *Estimating Curvature from Volume Fractions*. Computers & Structures, 83(6-7):425–434, 2005.
- [44] Poo, J. Y. und N. Ashgriz: *A Computational Method for Determining Curvatures*. Journal of Computational Physics, 84(2):483–491, 1989.
- [45] Francois, M. M. und B. K. Swartz: *Interface Curvature Via Volume Fractions, Heights, and Mean Values on Nonuniform Rectangular Grids*. Journal of Computational Physics, 229(3):527–540, 2010.
- [46] Hernandez, J., J. Lopez, P. Gomez, C. Zanzi und F. Faura: *A New Volume of Fluid Method in Three Dimensions - Part I: Multidimensional Advection Method with Face-Matched Flux Polyhedra*. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 58(8):897–921, 2008.
- [47] Lopez, J., C. Zanzi, P. Gomez, R. Zamora, F. Faura und J. Hernandez: *An Improved Height Function Technique for Computing Interface Curvature from Volume Fractions*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 198(33-36):2555–2564, 2009.

- [48] Lopez, J. und J. Hernandez: *On Reducing Interface Curvature Computation Errors in the Height Function Technique*. Journal of Computational Physics, 229(13):4855–4868, 2010.
- [49] Lucy, L. B.: *Numerical Approach to Testing of Fission Hypothesis*. Astronomical Journal, 82(12):1013–1024, 1977.
- [50] Atluri, S. N. und S. Shen: *The Meshless Local Petrov-Galerkin (Mlpg) Method*. Contemporary Research on Emerging Sciences and Technology. Tech Science Press, Encino, CA, 2002.
- [51] Smolinski, P. und T. Palmer: *Procedures for Multi-Time Step Integration of Element-Free Galerkin Methods for Diffusion Problems*. Computers & Structures, 77(2):171–183, 2000.
- [52] Zhang, X. G., X. H. Liu, K. Z. Song und M. W. Lu: *Least-Squares Collocation Meshless Method*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 51(9):1089–1100, 2001.
- [53] Liu, Y., X. Zhang und M. W. Lu: *A Meshless Method Based on Least-Squares Approach for Steady- and Unsteady-State Heat Conduction Problems*. Numerical Heat Transfer Part B: Fundamentals, 47(3):257–275, 2005.
- [54] Qian, L. F. und R. C. Batra: *Three-Dimensional Transient Heat Conduction in a Functionally Graded Thick Plate with a Higher-Order Plate Theory and a Meshless Local Petrov-Galerkin Method*. Computational Mechanics, 35(3):214–226, 2005.
- [55] Gu, Y. T. und G. R. Liu: *A Meshfree Weak-Strong (MWS) Form Method for Time Dependent Problems*. Computational Mechanics, 35(2):134–145, 2005.
- [56] Šterk, M. und R. Trobec: *Meshless Solution of a Diffusion Equation with Parameter Optimization and Error Analysis*. Engineering Analysis with Boundary Elements, 32(7):567–577, 2008.
- [57] Thakur, H., K. M. Singh und P. K. Sahoo: *Phase Change Problems Using the MLPG Method*. Numerical Heat Transfer Part A: Applications, 59(6):438–458, 2011.

- [58] Loukopoulos, V. C., G. C. Bourantas, E. D. Skouras und G. C. Nikiforidis: *Localized Meshless Point Collocation Method for Time-Dependent Magnetohydrodynamics Flow through Pipes under a Variety of Wall Conductivity Conditions*. Computational Mechanics, 47(2):137–159, 2011.
- [59] Trobec, R., G. Kosec, M. Šterk und B. Šarler: *Comparison of Local Weak and Strong Form Meshless Methods for 2-D Diffusion Equation*. Engineering Analysis with Boundary Elements, 36(3):310–321, 2012.
- [60] Boztosun, I. und A. Charafi: *An Analysis of the Linear Advection-Diffusion Equation Using Mesh-Free and Mesh-Dependent Methods*. Engineering Analysis with Boundary Elements, 26(10):889–895, 2002.
- [61] Wu, Z. M. und Y. C. Hon: *Convergence Error Estimate in Solving Free Boundary Diffusion Problem by Radial Basis Functions Method*. Engineering Analysis with Boundary Elements, 27(1):73–79, 2003.
- [62] La Rocca, A., A. Hernandez Rosales und H. Power: *Radial Basis Function Hermite Collocation Approach for the Solution of Time Dependent Convection-Diffusion Problems*. Engineering Analysis with Boundary Elements, 29(4):359–370, 2005.
- [63] Šarler, B. und R. Vertnik: *Meshfree Explicit Local Radial Basis Function Collocation Method for Diffusion Problems*. Computers & Mathematics with Applications, 51(8):1269–1282, 2006.
- [64] Stevens, D., H. Power, M. Lees und H. Morvan: *The Use of PDE Centres in the Local RBF Hermitian Method for 3D Convective-Diffusion Problems*. Journal of Computational Physics, 228(12):4606–4624, 2009.
- [65] Yao, G., B. Šarler und C. S. Chen: *A Comparison of Three Explicit Local Meshless Methods Using Radial Basis Functions*. Engineering Analysis with Boundary Elements, 35(3):600–609, 2011.
- [66] Arefmanesh, A., M. Najafi und H. Abdi: *A Meshless Local Petrov-Galerkin Method for Fluid Dynamics and Heat Transfer Applications*. Journal of Fluids Engineering-Transactions of the Asme, 127(4):647–655, 2005.

- [67] Sadat, H., N. Dubus, L. Gbahoue und T. Sophy: *On the Solution of Heterogeneous Heat Conduction Problems by a Diffuse Approximation Meshless Method*. Numerical Heat Transfer Part B: Fundamentals, 50(6):491–498, 2006.
- [68] Fang, J. N., G. F. Zhao, J. Zhao und A. Parriaux: *On the Truly Meshless Solution of Heat Conduction Problems in Heterogeneous Media*. Numerical Heat Transfer Part B: Fundamentals, 55(1):1–13, 2009.
- [69] Mulay, S. S., L. Hua und S. See: *On the Development of Adaptive Random Differential Quadrature Method with an Error Recovery Technique and Its Application in the Locally High Gradient Problems*. Computational Mechanics, 45(5):467–493, 2010.
- [70] Prax, C., H. Sadat und E. Dabboura: *Evaluation of High Order Versions of the Diffuse Approximate Meshless Method*. Applied Mathematics and Computation, 186(2):1040–1053, 2007.
- [71] Perko, J. und B. Šarler: *Weight Function Shape Parameter Optimization in Meshless Methods for Non-Uniform Grids*. CMES - Computer Modeling in Engineering & Sciences, 19(1):55–68, 2007.
- [72] Liu, X. und K. Tai: *Point Interpolation Collocation Method for the Solution of Partial Differential Equations*. Engineering Analysis with Boundary Elements, 30(7):598–609, 2006.
- [73] Bui, T. Q., T. N. Nguyen und H. Nguyen-Dang: *A Moving Kriging Interpolation-Based Meshless Method for Numerical Simulation of Kirchhoff Plate Problems*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 77(10):1371–1395, 2009.
- [74] Krysl, P. und T. Belytschko: *Analysis of Thin Plates by the Element-Free Galerkin Method*. Computational Mechanics, 17(1-2):26–35, 1995.
- [75] Firoozjaee, A. R. und M. H. Afshar: *Discrete Least Squares Meshless (DLSM) Method for Simulation of Steady State Shallow Water Flows*. Scientia Iranica, 18(4):835–845, 2011.

- [76] Gu, Y. T., P. Zhuang und Q. Liu: *An Advanced Meshless Method for Time Fractional Diffusion Equation*. International Journal of Computational Methods, 8(4):653–665, 2011.
- [77] Skouras, E. D., G. C. Bourantas, V. C. Loukopoulos und G. C. Nikiforidis: *Truly Meshless Localized Type Techniques for the Steady-State Heat Conduction Problems for Isotropic and Functionally Graded Materials*. Engineering Analysis with Boundary Elements, 35(3):452–464, 2011.
- [78] Amani, J., M. H. Afshar und M. Naisipour: *Mixed Discrete Least Squares Meshless Method for Planar Elasticity Problems Using Regular and Irregular Nodal Distributions*. Engineering Analysis with Boundary Elements, 36(5):894–902, 2012.
- [79] Zhou, X., Y. C. Hon und K. F. Cheung: *A Grid-Free, Nonlinear Shallow-Water Model with Moving Boundary*. Engineering Analysis with Boundary Elements, 28(8):967–973, 2004.
- [80] Wu, N. J., T. K. Tsay und D. L. Young: *Meshless Numerical Simulation for Fully Nonlinear Water Waves*. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 50(2):219–234, 2006.
- [81] Pal, P. und S. K. Bhattacharyya: *Sloshing in Partially Filled Liquid Containers-Numerical and Experimental Study for 2-D Problems*. Journal of Sound and Vibration, 329(21):4466–4485, 2010.
- [82] Reutskiy, S. Yu: *The Method of Approximate Fundamental Solutions (MAFS) for Stefan Problems*. Engineering Analysis with Boundary Elements, 36(3):281–292, 2012.
- [83] Vertnik, R., M. Založnik und B. Šarler: *Solution of Transient Direct-Chill Aluminium Billet Casting Problem with Simultaneous Material and Interphase Moving Boundaries by a Meshless Method*. Engineering Analysis with Boundary Elements, 30(10):847–855, 2006.
- [84] La Rocca, A. und H. Power: *A Hermite Radial Basis Function Collocation Approach for the Numerical Simulation of Crystallization Processes in a Channel*. Communications in Numerical Methods in Engineering, 22(2):119–135, 2006.

- [85] Vertnik, R. und B. Šarler: *Meshless Local Radial Basis Function Collocation Method for Convective-Diffusive Solid-Liquid Phase Change Problems*. International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow, 16(5):617–640, 2006.
- [86] Gao, Z. H., Y. M. Lai, M. Y. Zhang, J. L. Qi und S. J. Zhang: *An Element Free Galerkin Method for Nonlinear Heat Transfer with Phase Change in Qinghai-Tibet Railway Embankment*. Cold Regions Science and Technology, 48(1):15–23, 2007.
- [87] Vrankar, L., E. J. Kansa, L. Ling, F. Runovc und G. Turk: *Moving-Boundary Problems Solved by Adaptive Radial Basis Functions*. Computers & Fluids, 39(9):1480–1490, 2010.
- [88] Choudhury, A., K. Reuther, E. Wesner, A. August, B. Nestler und M. Rettenmayr: *Comparison of Phase-Field and Cellular Automaton Models for Dendritic Solidification in Al-Cu Alloy*. Computational Materials Science, 55:263–268, 2012.
- [89] Schäfer, A. und D. Fey: *Libgeodecomp: A Grid-Enabled Library for Geometric Decomposition Codes*. Proceedings of the 15th European PVM/MPI Users’ Group Meeting on Recent Advances in Parallel Virtual Machine and Message Passing Interface, Seiten 285–294, 2008.
- [90] Crank, J.: *The Mathematics of Diffusion*, Seite 11f. Clarendon Press, Oxford, 2. ed, reprint, Auflage, 1995.
- [91] Atluri, S. N. und S. Shen: *The Meshless Local Petrov-Galerkin (Mlpg) Method*, Seite 56. Contemporary Research on Emerging Sciences and Technology. Tech Science Press, Encino, CA, 2002.
- [92] Atluri, S. N. und S. Shen: *The Meshless Local Petrov-Galerkin (Mlpg) Method*, Seite 76. Contemporary Research on Emerging Sciences and Technology. Tech Science Press, Encino, CA, 2002.
- [93] Jiao, X. und H. Zha: *Consistent Computation of First- and Second-Order Differential Quantities for Surface Meshes*, 2008. 1364924 159-170.

- [94] Crank, J.: *The Mathematics of Diffusion*, Seite 24f. Clarendon Press, Oxford, 2. ed, reprint, Auflage, 1995.
- [95] Smith, V. G., W. A. Tiller und J. W. Rutter: *A Mathematical Analysis of Solute Redistribution During Solidification*. Canadian Journal of Physics, 33(12):723–745, 1955.
- [96] Tiller, W. A., K. A. Jackson, J. W. Rutter und B. Chalmers: *The Redistribution of Solute Atoms During the Solidification of Metals*. Acta Metallurgica, 1(4):428–437, 1953.
- [97] Allen, D. N. D. und R. T. Severn: *Application of Relaxation Methods to Solution of Non-Elliptic Partial Differential Equations .3. Heat Conduction, with Change of State, in 2 Space Dimensions*. Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics, 15(Feb):53–62, 1962.
- [98] Zabaras, N. und S. Mukherjee: *An Analysis of Solidification Problems by the Boundary Element Method*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 24(10):1879–1900, 1987.
- [99] Jo, J. C., W. K. Shin und C. Y. Choi: *Multidimensional Phase Change Problems by the Dual-Reciprocity Boundary-Element Method*. Numerical Heat Transfer Part B: Fundamentals, 36(1):95–113, 1999.
- [100] Zabaras, N. und Y. Ruan: *Moving and Deforming Finite-Element Simulation of 2-Dimensional Stefan-Problems*. Communications in Applied Numerical Methods, 6(7):495–506, 1990.
- [101] Rathjen, K. A. und L. M. Jiji: *Heat Conduction with Melting or Freezing in a Corner*. Journal of Heat Transfer, 93(1):101–109, 1971.
- [102] Mullins, W. W. und R. F. Sekerka: *Morphological Stability of a Particle Growing by Diffusion or Heat Flow*. Journal of Applied Physics, 34(2):323–329, 1963.
- [103] Osher, S. und R. Fedkiw: *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*, Band 153 der Reihe *Applied Mathematical Sciences*. Springer, New York, 1. Auflage, 2003.
- [104] de Groen, P. P. N.: *An Introduction to Total Least Squares*. eprint ArXiv.math/9805076, 1996.

Anhang A.

Formelzeichen

Indizes und Modifikatoren

\vec{a}	Geometrischer Vektor	a^P	Wert aus einem bekannten Phasendiagramm
\boldsymbol{a}	Algebraischer Spaltenvektor	a^{rep}	Numerische Repräsentation einer Größe
\boldsymbol{a}^T	Algebraischer Zeilenvektor	a^s	Auf die Dendritenspitze bezogen
\tilde{a}	Angenäherter Wert	a^t	Wert zum Zeitpunkt t.
a'	Koordinate im rotierten Koordinatensystem	a^Γ	Auf die Grenzfläche bezogene Größe
a^*	Gleichgewichtsgröße	a_i	Element eines algebraischen Vektors
a^a	Analytische Lösung	a_t	Zum Punkt \vec{x}_t gehörig
a^c	Auf die Mitte des Simulationsraumes bezogen	$a_{i,j}$	Element einer Matrix (i -te Zeile, j -te Spalte)
$a^{t,j}$	Zustandsvariable der Zelle (i,j) an Position $\vec{x}^{t,j}$	a_l	Auf die Flüssigphase bezogene Größe
$a^{t,j,t}$	Zustandsvariable der Zelle (i,j) an Position $\vec{x}^{t,j}$ zur Zeit t .	$a_{x/y}$	Komponente eines geometrischen Vektors
a^b	Physikalische Entsprechung einer Modell-	a_s	Auf die Festphase bezogene Größe
		δa	Numerischer Darstellungsfehler einer Größe
		$\downarrow \overline{a}$	Größe, auf die ein vorhergehender Differentialoperator wirkt

Lateinische Buchstaben

$\mathbb{1}$	Einheitsmatrix	g	Koeffizienten der Gauss-Quadratur
a	Koeffizienten für kleinste-Quadrate-Anpassung oder RBF	f	beliebige Funktion
		f_s	Festphasenanteil einer Zelle
		k	Verteilungskoeffizient

l	Länge des Dendriten	I	Intervall zwischen zwei Rotationsschritten
m	Anstieg der Liquiduslinie	I_0	Drehintervall zu Beginn der Simulation
m	Natürliche Zahl	I_m	Minimales Drehintervall
m_I	negativer Anstieg des Drehintervalls mit zunehmender Zahl an Simulationsschritten	K	Matrix für Berechnung schwacher Lösung
\vec{n}	Normalenrichtung	L	Matrix für Berechnung schwacher Lösung
n	Natürliche Zahl	L	Seitenlänge der Domäne
p	Phasenzugehörigkeit einer Zelle	L_∞	Maximaler Fehler
q	Koeffizient für die Anisotropiekorrektur	L_2	Mittlerer quadratischer Fehler
s	Boolescher Wert für die Zusammengehörigkeit benachbarter Zellen	M	Anzahl Punkte in der Nachbarschaft oder Simulationsdomäne
u	Punktwert	N	Atommenge in einer Zelle
v	Testfunktion der schwachen Formulierung	N	Anzahl Funktionen für die kleinste-Quadrate-Anpassung
v	Grenzflächengeschwindigkeit	R	Kreisradius
\vec{x}	Ortsvektor	$R(x)$	radiale Basisfunktion
x	Ortskoordinate	R_0	Nachbarschaftsradius
x^g	Positionen der Gauss-Quadratur	R_0	Grundmatrix der RBF
y	Ortskoordinate	R	Rotationsmatrix
A	Abstand zweier Zellen in x -Richtung	S	Schwellwert in der Rotation
A	Matrix der linken Seite in GWQ/DAM	T	Temperatur
B	Abstand zweier Zellen in y -Richtung	T	Translationsmatrix
B	Matrix der rechten Seite in GWQ/DAM	U	Zeitschrittoperator
C	Konzentration	U^{rep}	Numerische Repräsentation des Zeitschrittoperators
D	Diffusionskoeffizient	U^{num}	totaler numerischer Zeitschrittoperator
G	Anzahl Punkte in der Gauss-Quadratur		

Griechische Buchstaben

α	Rotationswinkel	γ^0	Gibbs-Thomson-Koeffizient
α	Temperaturleitfähigkeit	ε	Anisotropieparameter der Grenzflächenenergie
δ	Delta-Distribution	η	Glättungsparameter der vereinfachten Kollokation
δ	Variationsoperator	κ	Krümmung
δf_s	Für die Anisotropiekorrektur abgezwigter Festphasenanteil	Ξ	Bei kleinste-Quadrate-Anpassungen zu minimierende Fehlerfunktion
$\delta_{i,j}$	Kronecker-Delta	ρ	Punktdichte
γ	Grenzflächenenergie		

$\rho_{\min, \max}$	Minimale, Maximale Punktdichte	ΔN	Veränderung der Menge an Legierungsatomen
σ	Standardabweichung	ΔN_s	Anzahl Schritte, die eine Zelle zum vollständigen Erstarren benötigt
σ^*	Stabilitätsparameter	ΔT	Unterkühlung
φ	Formfunktion	$(\Delta\varphi)$	Formfunktion der zweiten Ableitung
$\vec{\nabla}$	Nabla-Operator	Θ	tatsächliche Wachstumsrichtung
$\nabla_{\vec{n}}$	Richtungsableitung	Θ_0	bevorzugte Wachstumsrichtung
∇_t	Tangentialableitung am Rand des Simulationsraums	Φ	Formfunktionenmatrix
Δ	Laplace-Operator	Ψ	Diskretisierte rechte Seite der Diffusionsgleichung
Δd	Minimaler paarweiser Abstand	Ω	Simulationsdomäne
Δf_s	Zuwachs des Festphasenanteils in einem Zeitschritt	Ω_t	Teildomäne
Δt	Zeitschritt		
$\Delta x, \Delta y$	Parameter des kartesischen Gitters		

Anhang B.

Mathematische Formeln & Grundlagen

B.1. Für diese Arbeit relevante Methoden für reguläre, quadratische Gitter

B.1.1. Finite Differenzen

Auf einer regelmäßigen eindimensionalen Anordnung von Punkten x^t mit einem gleichmäßigen Abstand $x^t - x^{t-1} = \Delta x \forall t$ können die Ableitungen einer Funktion $f(x)$, die durch ihre Werte $f^t = f(x^t)$ auf den Punkten repräsentiert ist, folgendermaßen genähert werden:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x^t} = \frac{f^{t+1} - f^t}{\Delta x} + O(h) \quad \text{Rechtsseitige Ableitung} \quad (\text{B.1})$$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x^t} = \frac{f^t - f^{t-1}}{\Delta x} + O(h) \quad \text{Linksseitige Ableitung} \quad (\text{B.2})$$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x^t} = \frac{f^{t+1} - f^{t-1}}{2\Delta x} + O(h^2) \quad \text{Zentraldifferenz} \quad (\text{B.3})$$

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{x^t} = \frac{f^{t+1} - 2f^t + f^{t-1}}{\Delta x^2} + O(h^2) \quad \text{Zweite Ableitung} \quad (\text{B.4})$$

Für die Berechnung der einseitigen Richtungsableitung in zwei Dimensionen in Richtung des Einheitsvektors $\vec{n} = (n_x, n_y)$ gilt entsprechend auf einem zweidimensionalen quadrati-

schen Punktgitter mit den Gitterpunkten $\vec{x}^{t,j} = (x^{t,j}, y^{t,j})$:

$$\nabla_{\vec{n}} f|_{\vec{x}^{t,j}} = \vec{n} \cdot \nabla f|_{\vec{x}^{t,j}} = n_x \frac{f^{t+\text{sign}(n_x),j} - f^{t,j}}{\Delta x} + n_y \frac{f^{t,j+\text{sign}(n_y)} - f^{t,j}}{\Delta y} \quad (\text{B.5})$$

Hierbei ist $\text{sign}(x)$ die Vorzeichenfunktion:

$$\text{sign}(x) = \begin{cases} -1 & x < 0 \\ 0 & x = 0 \\ 1 & x > 0 \end{cases}$$

B.1.2. Bilineare Interpolation in zwei Dimensionen

Um den Wert der Funktion y an einem Punkt \vec{x} , der innerhalb des Quadrats $\vec{x}^{t,j}$, $\vec{x}^{t+1,j}$, $\vec{x}^{t+1,j+1}$, $\vec{x}^{t,j+1}$ liegt, zu bestimmen, wird der Funktionswert durch die Werte der Funktion an diesen Punkten $f^{t,j}$ bestimmt: Mit den transformierten Koordinaten $u = (x - x^{t,j})/\Delta x$ und $v = (y - y^{t,j})/\Delta y$ gilt dabei:

$$f(\vec{x}) = (1-u)(1-v)f^{t,j} + (1-u)vf^{t,j+1} + uvf^{t+1,j+1} + u(1-v)f^{t+1,j} \quad (\text{B.6})$$

B.1.3. Krümmungsberechnung mittels des Level-Set-Ansatzes

Bei der "Level-Set"-Methode wird die Krümmung einer Grenzfläche, die als Höhenlinie eines stetigen Feldes f repräsentiert ist, durch Ableitungen dieses Feldes beschrieben [103]:

$$\kappa = \frac{\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)^2 + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)^2 - 2 \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}}{\left[\left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)^2 \right]^{\frac{3}{2}}} \quad (\text{B.7})$$

B.1.4. Krümmungsberechnung mittels einer Höhenfunktion

Bei der Höhenfunktionsmethode wird die Summe der Festphasenanteilen in drei Spalten zu sieben Zellen gebildet. Durch diese drei "Höhenwerte", die sich in der Mitte der Spalten befinden, wird dann ein Polynom zweiter Ordnung gelegt, dessen Krümmung als Grenz-

flächenkrümmung angenommen wird (Abbildung B.1). Die Spalten können dabei in x-, oder y-Richtung liegen, abhängig von der größeren Komponente der Normalenrichtung, die daher schon vor der Krümmungsberechnung wenigstens näherungsweise bekannt sein muss. In zwei Dimensionen ist eine Polynom zweiter Ordnung durch drei Punkte eindeutig bestimmt. In drei Dimensionen besitzt ein Polynom zweiter Ordnung sechs Komponenten, während die Höhenfunktionskonstruktion neun Punkte ergibt (3×3 Spalten). Die Parameter des Polynoms müssen dann durch kleinste-Quadrate-Annäherung angepasst werden. Alternativ wären auch Finite Differenzen möglich.

B.1.5. Rotation eines Gitters um einen beliebigen Punkt

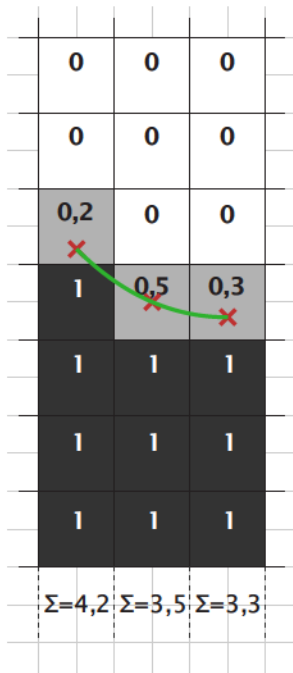


Abbildung B.1: Prinzip der Krümmungsberechnung mittels einer Höhenfunktion (Abbildung nach [43]).

Nach der Rotation des Gitters um den Winkel α um einen beliebigen Punkt (x_0, y_0) lassen sich zu den Zellkoordinaten des neuen Gitters (x', y') die dazugehörige Position (x, y) im alten Gitter unter Verwendung homogener Koordinaten finden:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ 1 \end{pmatrix} = T^{-1} R^{-1} T \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.8})$$

Dabei ist T die Translationsmatrix

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & x_0 \\ 0 & 1 & y_0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.9})$$

und R die Rotationsmatrix:

$$R = \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.10})$$

B.2. Kleinste-Quadrate-Anpassungen

B.2.1. Klassische Kleinste-Quadrate-Anpassung

Bei einer kleinsten-Quadrate-Anpassung soll eine Funktion $\tilde{f}(x) = \sum_i a_i f_i(x)$ mit den vorgegebenen Teilfunktionen $f_i(x)$ und den Parametern a_i , $i = 1 \dots N$ über die Wahl ebendieser bestmöglich an eine Menge an Punkten (x_j, y_j) , $j = 1 \dots M$, $M > N$ angepasst werden. Dafür wird der (gewichtete) quadratische Fehler

$$\Xi = \sum_j^M w_j \left(y_j - \sum_i^N a_i f_i(x_j) \right)^2 \quad (\text{B.11})$$

minimiert. Dabei kann optional jedem Punkt j eine eigene Wichtung w_j vorgegeben werden. Im Minimum der Fehlerfunktion muss deren Ableitung nach allen Parametern a_i verschwinden:

$$0 = \frac{\partial \Xi}{\partial a_i} = 2 \sum_j^M w_j f_i(x_j) \left(y_j - \sum_k^N a_k f_k(x_j) \right) \quad (\text{B.12})$$

Daraus ergibt sich ein symmetrisches, lineares Gleichungssystem für die Parameter a_i :

$$\begin{pmatrix} \sum_j^M w_j f_1(x_j)^2 & \dots & \sum_j^M w_j f_1(x_j) f_N(x_j) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_j^M w_j f_N(x_j) f_1(x_j) & \dots & \sum_j^M w_j f_N(x_j)^2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_j^M w_j f_1(x_j) y_j \\ \vdots \\ \sum_j^M w_j f_N(x_j) y_j \end{pmatrix} \quad (\text{B.13})$$

Auch wenn x hier als Skalar notiert ist, sind dafür auch Vektoren möglich. In dieser Arbeit stellen die f_i im Allgemeinen eine vollständige monomische Basis der jeweiligen Dimension und Grad dar.

B.2.2. Methode der kleinsten Abstandsquadrate

Gesucht ist die Gerade $y = a_0 + a_1 x$, die zu den Punkten (x_i, y_i) , $i = 1 \dots N$ den (gewichteten) summierten minimalen Abstand besitzt. Diese Gerade schneidet immer den Schwerpunkt $(\bar{x}, \bar{y}) = \frac{1}{M} \sum_i^M (x_i, y_i)$ [104], und besitzt daher im Schwerpunktsystem $(\tilde{x}_i, \tilde{y}_i) = (x_i, y_i) - (\bar{x}, \bar{y})$ die

Form:

$$\tilde{y} = a_1 \tilde{x} \quad (\text{B.14})$$

Die Lösung einer klassischen kleinste-Quadrate-Anpassung für diese Gleichung lautet:

$$a_1 = \frac{\sum_t^M w_t x_t y_t}{\sum_t^M w_t x_t^2} \quad (\text{B.15})$$

Nun wird ein um einen beliebigen Winkel α rotiertes Koordinatensystem

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha \\ \sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{x} \\ \tilde{y} \end{pmatrix} \quad (\text{B.16})$$

betrachtet. Existiert nun ein Koordinatensystem, in dem der die mittels (B.15) bestimmte Anstieg verschwindet, die Gerade also mit der x' -Richtung koinzidiert, so ist diese Gerade die Gesuchte. Daraus folgt:

$$a_1^\pm = -\tan \alpha^\pm = \frac{1}{2} \frac{\sum_t^M w_t \tilde{y}_t^2 - \sum_t^M w_t \tilde{x}_t^2 \pm \sqrt{\left(\sum_t^M w_t \tilde{y}_t^2 - \sum_t^M w_t \tilde{x}_t^2\right)^2 + 4 \sum_t^M w_t (\tilde{x}_t \tilde{y}_t)^2}}{\sum_t^M w_t \tilde{x}_t \tilde{y}_t} \quad (\text{B.17})$$

Die beiden Lösungen entsprechen dabei den Geraden mit dem jeweils minimalen und maximalen gewichteten summierten Abstand. Diese Geraden stehen senkrecht aufeinander. Je nach Vorzeichen der Differenz der summierten gewichteten Abstände der beiden Geraden

$$\left| \sum_t^M w_t y'_t \right|_{a_1^+} - \left| \sum_t^M w_t y'_t \right|_{a_1^-} = \left(\sum_t^M w_t \tilde{x}_t^2 - \sum_t^M w_t \tilde{y}_t^2 \right) \frac{(a_1^+)^2 - 1}{(a_1^+)^2 + 1} = \left(\sum_t^M w_t \tilde{x}_t^2 - \sum_t^M w_t \tilde{y}_t^2 \right) \frac{1 - (a_1^-)^2}{(a_1^-)^2 + 1} \quad (\text{B.18})$$

kann der gewünschte Anstieg a_1 ausgewählt werden. Die gesuchte Normalenrichtung hat schlussendlich die Form (mit unbekanntem Vorzeichen):

$$\vec{n} = \pm \frac{1}{\sqrt{1+a^2}} \begin{pmatrix} a \\ -1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.19})$$

B.3. Gitterlose Interpolationsmethoden

B.3.1. Radiale Basisfunktionen (RBF)

Um jeden Punkt \vec{x}_i wird eine radiale Basisfunktion $R_i(\vec{x}) = R(|\vec{x} - \vec{x}_i|)$ beschrieben. Die gewichtete Summe aller Basisfunktionen ergibt das kontinuierliche Konzentrationsfeld:

$$C(\vec{x}) = \sum_i^M a_i R_i(\vec{x}) = \mathbf{R}^T(\vec{x}) \times \mathbf{a} \quad (\text{B.20})$$

Die Interpolationsmethode der radialen Basisfunktionen beruht auf dem Fakt, dass für eine Punktmenge mit paarweise unterschiedlichen Punkten ein Koeffizientenvektor \mathbf{a} existiert, sodass das Interpolationskriterium $\varphi_i(\vec{x}_j) = \delta_{i,j}$ gilt, d.h.:

$$C(\vec{x}_i) = u_i = \sum_j^M R_j(\vec{x}_i) a_j \quad \forall i \quad (\text{B.21})$$

Stellt man diese Gleichung für alle Punkte \vec{x}_i auf, so ergibt sich folgendes Gleichungssystem:

$$\begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_1(\vec{x}_1) & \cdots & R_M(\vec{x}_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ R_1(\vec{x}_M) & \cdots & R_M(\vec{x}_M) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_M \end{pmatrix} \quad (\text{B.22})$$

Oder in kompakter Form:

$$\mathbf{u} = \mathbf{R}_0 \mathbf{a} \quad (\text{B.23})$$

Daher gilt für den Koeffizientenvektor \mathbf{a} :

$$\mathbf{a} = \mathbf{R}_0^{-1} \mathbf{u} \quad (\text{B.24})$$

Zusammen mit Gleichung (B.20) ergibt sich also für die Konzentration an jedem Ort des Simulationsraumes:

$$C(\vec{x}) = \mathbf{R}^T(\vec{x}) \mathbf{R}_0^{-1} \mathbf{u} \quad (\text{B.25})$$

Der Formfunktionsvektor nach Gleichung (2.4) hat für radiale Basisfunktionen also die Form:

$$\boldsymbol{\varphi}_{\text{RBF}}^T(\vec{x}) = \mathbf{R}^T(\vec{x})\mathbf{R}_0^{-1} \quad (\text{B.26})$$

Für diesen Formfunktionsvektor gilt per Definition die Interpolationsbedingung, d.h.:

$$\varphi_{i,\text{RBF}}(\vec{x}_j) = \delta_{i,j} \quad (\text{B.27})$$

Anders ausgedrückt ist der Wert der Interpolations an einem Punkt immer identisch mit seinem Wert.

Der Formfunktionsvektor für den Laplace-Operator ergibt sich entsprechend aus:

$$\Delta \boldsymbol{\varphi}_{\text{RBF}}^T(\vec{x}) = \left(\Delta \mathbf{R}^T(\vec{x}) \right) \mathbf{R}_0^{-1} \quad (\text{B.28})$$

B.3.2. Gleitende kleinste-Quadrate-Anpassung (GWQ)

Für Anpassung am Ort \vec{x} mit einem gewählten Satz von N Funktionen $f(\vec{x})$ ergibt sich der Koeffizientenvektor \mathbf{a} als Lösung der Gleichung (B.13)(siehe B.2.1):

$$\begin{pmatrix} \sum_i^M w_i(\vec{x})f_i(\vec{x}_i)f_i(\vec{x}_i) & \cdots & \sum_i^M w_i(\vec{x})f_i(\vec{x}_i)f_N(\vec{x}_i) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_i^M w_i(\vec{x})f_N(\vec{x}_i)f_i(\vec{x}_i) & \cdots & \sum_i^M w_i(\vec{x})f_N(\vec{x}_i)f_N(\vec{x}_i) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_i^M w_i(\vec{x})f_i(\vec{x}_i)u_i \\ \vdots \\ \sum_i^M w_i(\vec{x})f_N(\vec{x}_i)u_i \end{pmatrix} \quad (\text{B.29})$$

Der Vektor auf der rechten Seite kann auch als Matrix-Vektor-Produkt geschrieben werden:

$$\text{R.S.} = \begin{pmatrix} w_1(\vec{x})f_1(\vec{x}_1) & \cdots & w_M(\vec{x})f_1(\vec{x}_M) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ w_1(\vec{x})f_N(\vec{x}_1) & \cdots & w_M(\vec{x})f_N(\vec{x}_M) \end{pmatrix} \times \mathbf{u} \quad (\text{B.30})$$

Dann kann man Gleichung (B.29) schreiben als

$$A(\vec{x})\mathbf{a} = B(\vec{x})\mathbf{u} \quad (\text{B.31})$$

und somit

$$\mathbf{a}(\vec{x}) = A^{-1}(\vec{x})B(\vec{x})\mathbf{u} \quad (\text{B.32})$$

Für die Interpolation an jedem Punkt ergibt sich damit:

$$C(\vec{x}) = \mathbf{f}^T(\vec{x})\mathbf{a}(\vec{x}) = \mathbf{f}^T(\vec{x})A^{-1}(\vec{x})B(\vec{x})\mathbf{u} \quad (\text{B.33})$$

Der Formfunktionsvektor für die gleitende gewichtete kleinste Quare-Anpassung ist also

$$\boldsymbol{\varphi}_{\text{GWQ}}^T(\vec{x}) = \mathbf{f}^T(\vec{x})A^{-1}(\vec{x})B(\vec{x}) \quad (\text{B.34})$$

Es ist dabei anzumerken, dass dieser Formfunktionsvektor im Gegensatz zu dem der RBF-Methodik nicht das Interpolationskriterium erfüllt. Das bedeutet, dass sich die interpolierten Konzentrationen an den Punkten von deren Werten unterscheiden können. Mittels der Formfunktionsmatrix $\Phi_{i,j} = \varphi_{i,\text{GWQ}}(\vec{x}_j)$ und deren Inversen können sie ineinander umgerechnet werden:

$$C(\vec{x}_j) = \sum_i^M \Phi_{i,j} u_i \quad (\text{B.35})$$

$$u_i = \sum_j^M \Phi_{i,j}^{-1} C(\vec{x}_j) \quad (\text{B.36})$$

Für den Formfunktionsvektor für den Laplace-Operator ergibt sich:

$$\begin{aligned} (\Delta\boldsymbol{\varphi})_{\text{GKQ}}^T &= \Delta \overset{\downarrow}{\mathbf{f}}^T \times (A^{-1}B) \\ &+ \vec{\nabla} \overset{\downarrow}{\mathbf{f}}^T \times \left(\vec{\nabla} \overset{\downarrow}{A^{-1}B} + A^{-1} \vec{\nabla} B \right) \\ &+ \mathbf{f}^T \times \left(\Delta \overset{\downarrow}{A^{-1}B} + 2 \vec{\nabla} \overset{\downarrow}{A^{-1}} \vec{\nabla} \overset{\downarrow}{B} + A^{-1} \Delta B \right) \end{aligned} \quad (\text{B.37})$$

Für die auftretenden Ableitungen der Inversen gilt:

$$\partial A^{-1} = -A^{-1} \partial A A^{-1} \quad (\text{B.38})$$

$$\partial^2 A^{-1} = 2 A^{-1} \partial \overset{\downarrow}{A} A^{-1} \partial \overset{\downarrow}{A} A^{-1} - A^{-1} \partial^2 \overset{\downarrow}{A} A^{-1} \quad (\text{B.39})$$

Die Ableitungen der Matrixelemente enthalten lediglich die Ableitungen der Wichtungsfunktion:

$$\partial A_{i,j} = \sum_k^M f_i(\vec{x}_k) f_j(\vec{x}_k) \partial w_k(\vec{x}) \quad (\text{B.40})$$

$$\partial^2 A_{i,j} = \sum_k^M f_i(\vec{x}_k) f_j(\vec{x}_k) \partial^2 w_k(\vec{x}) \quad (\text{B.41})$$

$$\partial B_{i,j} = f_i(x_j) \partial w_j(\vec{x}) \quad (\text{B.42})$$

$$\partial^2 B_{i,j} = f_i(x_j) \partial^2 w_j(\vec{x}) \quad (\text{B.43})$$

B.3.3. Einfache kleinste-Quadrate-Anpassung - Diffuse Approximationsmethode (DAM)

Bei der DAM werden in der GWQ-Formfunktion die Ableitungsterme der Wichtungsfunktion vernachlässigt. Damit hat der Formfunktionsvektor des Laplace-Operators die Form:

$$(\Delta \varphi)_{\text{DAM}}^T(\vec{x}) = \Delta f^T(\vec{x}) \times (A^{-1}(\vec{x}) B(\vec{x})) \quad (\text{B.44})$$

Die Formfunktionen des Feldes selbst sind hingegen identisch mit denen der GWQ.

B.4. Explizite Zeit-Vorwärtsintegration der Diffusionsgleichung

B.4.1. Allgemeine Formulierung und Stabilitätskriterium

Je nach gewählter Methode (FD oder gitterlos) wird die rechte Seite der Diffusionsgleichung (3.1) in einen diskretisierten Operator Ψ , der vom Ort und (allgemein formuliert) dem Vektor aller auf dem Gitter repräsentierten Konzentrationen \mathbf{C} abhängt, umgewandelt:

$$\vec{\nabla}(D_{l,s} \cdot \vec{\nabla} C_{l,s}) \Big|_{\vec{x}} \rightarrow \Psi(\vec{x}, \mathbf{C}) \quad (\text{B.45})$$

Mit diesem wird aus der Diffusionsgleichung eine gewöhnliche Differentialgleichung der Zeit:

$$\left. \frac{dC}{dt} \right|_{\vec{x}} = \Psi(\vec{x}, C) \quad (\text{B.46})$$

Die Variante mit dem geringsten Rechenaufwand ist die explizite Zeit-Vorwärtsintegration. Dabei wird zunächst die Zeitableitung in eine finite Differenz erster Ordnung umgewandelt:

$$\frac{dC}{dt} \rightarrow \frac{C^{t+\Delta t} - C^t}{\Delta t} \quad (\text{B.47})$$

Des Weiteren wird die diskretisierte rechte Seite Ψ aus dem aktuellen Zustand des Modells zum Zeitpunkt t errechnet. Daraus ergibt sich:

$$C^{t+\Delta t}(\vec{x}) = C^t(\vec{x}) + \Delta t \Psi(\vec{x}, C) \quad (\text{B.48})$$

B.4.2. Formulierung für Finite Differenzen

Mit Finiten Differenzen zweiter Ordnung (Abschnitt B.1.1) hat die diskretisierte Diffusionsgleichung mit örtlich konstantem Diffusionskoeffizienten in zwei Dimensionen die Form:

$$C^{t,j,t+\Delta t} = C^{t,j,t} + D\Delta t \frac{C^{t+1,j,t} + C^{t-1,j,t} + C^{t,j+1,t} + C^{t,j-1,t} - 4C^{t,j,t}}{\Delta x^2} \quad (\text{B.49})$$

B.4.3. Integrationsmethoden für gitterlose Methoden

Kollokation

Bei der Kollokation soll die Gleichung (B.48) an bestimmten Punkten \vec{x}_i exakt gelöst werden. In dieser Arbeit sind diese identisch mit den Gitterpunkten. Es gilt also an diesen Punkten:

$$C(\vec{x}_i)^{t+\Delta t} = C(\vec{x}_i)^t + D\Delta t \Delta \varphi^T(\vec{x}_i) \mathbf{u} \quad (\text{B.50})$$

Für die RBF-Methode, die das Interpolationskriterium erfüllt und für die also $C(\vec{x}_i) = u_i$ gilt, ist dies gleichzeitig die Entwicklungsgleichung für die Werte der Punkte.

Für die kleinste-Quadrate-Methoden gilt hingegen

$$C(\vec{x}_t)^t = \Phi \mathbf{u}^t \quad (\text{B.51})$$

und damit:

$$\Phi \mathbf{u}^{t+\Delta t} = (\Phi + D\Delta t\Delta\Phi) \mathbf{u}^t \quad (\text{B.52})$$

Hierbei gilt in Anlehnung an die Formfunktionsmatrix $\Delta\Phi_{t,j} = (\Delta\varphi)_t(\vec{x}_j)$. Dies bedeutet, dass für jeden Zeitschritt ein lineares Gleichungssystem für alle \mathbf{u}_t gelöst werden muss.

Schwache Formulierung

Bei der schwachen Formulierung wird die Gleichung (B.48) mit einer beliebigen Testfunktion $v(\vec{x})$ multipliziert und über einen Teil der Simulationsdomäne integriert:

$$\int_{\Omega_t} v(\vec{x}) C^{t+\Delta t}(\vec{x}) d\Omega = \int_{\Omega_t} v(\vec{x}) (C^t(\vec{x}) + \Delta t \Psi(\vec{x}, C)) d\Omega \quad (\text{B.53})$$

In dieser Arbeit wurde v als Konstante gewählt und kann daher in den folgenden Betrachtungen vernachlässigt werden. Zur Berechnung des Intervalls kann eine beliebige numerische Integrationsmethode, zum Beispiel die Gaußsche Quadratur angewandt werden. Wie bei den weitaus meisten numerischen Integrationsmethoden wird dabei das Integral $\int y dx$ in eine gewichtete Summe $\sum_j^G g_j y(x_j^g)$ umgewandelt. Damit erhält Gleichung (B.53) die Form

$$\sum_j^G g_j C^{t+\Delta t}((\vec{x}_j^g)_t) = \sum_j^G g_j (C^t((\vec{x}_j^g)_t) + \Delta t \Psi((\vec{x}_j^g)_t, C)) \quad (\text{B.54})$$

Mit den Formfunktionen (unabhängig von der Interpolationsmethode) ergibt sich also als Gleichung in der Teildomäne Ω_t :

$$\sum_j^G g_j \sum_k u_k^{t+\Delta t} \varphi_k((\vec{x}_j^g)_t) = \sum_j^G g_j \sum_k u_k^t \varphi_k((\vec{x}_j^g)_t) + D\Delta t \sum_j^G g_j \sum_k u_k^t (\Delta\varphi)_k((\vec{x}_j^g)_t) \quad (\text{B.55})$$

Dies ist wiederum eine lineare Gleichung, die die Knotenwerte zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ mit denen zum Zeitpunkt t verknüpfen. Stellt man diese nun für so viele Teildomänen auf,

wie Punkte vorhanden sind, so erhält man wieder ein lösbares lineares Gleichungssystem $K\mathbf{u}^{t+\Delta t} = L\mathbf{u}^t$ für alle Punkte:

$$K_{t,k} = \sum_j^G g_j \varphi_k((\vec{x}_j^g)_t) \quad (\text{B.56})$$

$$L_{t,k} = \sum_j^G g_j \left(\varphi_k((\vec{x}_j^g)_t) + D\Delta t (\Delta\varphi)_k((\vec{x}_j^g)_t) \right) \quad (\text{B.57})$$

B.5. Maximale und minimale Punktdichte in zwei Dimensionen bei gegebenem Minimalabstand

Die maximale Punktdichte in zwei Dimensionen mit gegebenem Minimalabstand ist bei einer perfekten hexagonalen Anordnung der Punkte erreicht. Dessen Punktdichte beträgt in Abhängigkeit des Abstandes nächster Nachbarn:

$$\rho_{\max} = \rho_{\text{hexagonal}} = \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \Delta d^2 \right)^{-1} \approx 1,115 \Delta d^{-2} \quad (\text{B.58})$$

Die minimale Punktdichte bei gegebenem Minimalabstand ist bei der Anordnung mit möglichst wenigen Punkten erreicht, bei der alle Punkte den Minimalabstand zueinander einhalten, es jedoch nicht möglich ist, einen weiteren Punkt zu setzen. Dies ist bei einer hexagonalen Anordnung der Fall, deren Gitterkonstante (um einen infinitesimal kleinen Wert) geringer als $\sqrt{3}\Delta d$ ist. Solange sie darunter liegt, existieren keine Zwischengitterplätze, die den Mindestabstand zu allen Nachbarn einhalten. Diese tauchen erst bei diesem Wert auf. Ebenso taucht ein Zwischengitterplatz auf, sobald nur ein einziger Punkt in diesem Gitter um einen beliebig kleinen Wert verschoben wird. Damit ist diese hexagonale Anordnung diejenige mit der kleinsten möglichen Punktdichte. Diese liegt bei

$$\rho_{\min} = \left(\frac{3\sqrt{3}}{2} \Delta d^2 \right)^{-1} \approx 0,385 \Delta d^{-2} \quad (\text{B.59})$$

Thesen

1. Für die Berechnung der Grenzflächengeometrie im Rahmen von zelluläre Automaten-Modellen stellt der gegenwärtig in der Literatur vorherrschend eingesetzte Level Set-Ansatz mit Finiten Differenzen nicht das Optimum dar.
2. Durch den Einsatz der Höhenfunktionsmethode oder des Level Set-Ansatzes mit kleinste Quadrate-Anpassung in etwas größerer Umgebung lassen sich wesentlich bessere Ergebnisse erzielen.
3. Durch die Einführung einer Modifikation zur Abschwächung des anisotropen Gittereinflusses, die das Grenzflächenwachstum in Gitterrichtung hemmt und in die bevorzugte Richtung fördert, lässt sich gleichachsige dendritische Erstarrung auch in Richtungen abseits der Gitterrichtungen simulieren.
4. Bei unphysikalischer Erhöhung der Stärke der Grenzflächenenergieanisotropie ist es mittels der Rotation des Gitters während der Simulation möglich, bei geeigneter Wahl des Rotationsintervalls gitterunabhängiges dendritisches Wachstum zu simulieren.
5. Es ist möglich, die Diffusionsgleichung mittels einer Repräsentation des Raumes durch ein isotropes Punktgitter mit paarweisem Minimalabstand der Punkte zu integrieren.
6. Dies ist jedoch nicht mit "klassischen" gitterlosen Integrationsmethoden möglich. Vielmehr wird dafür eine vereinfachte Kollokation mit Glättung benötigt.
7. Von den gitterlosen Interpolationsmethoden weist die diffuse Approximationsmethode das geringste Fehlerniveau bei Simulationen auf diesen Gittern auf.
8. Mittels einer Repräsentation der Grenzfläche durch Partikel lassen sich Phasenumwandlungsprozesse auf solch einem Gitter simulieren. Die beidseitige Kopplung der Grenzflächenbewegung an das umgebende Temperatur- oder Konzentrationsfeld wird dabei korrekt wiedergegeben, sodass bekannte analytische bzw. veröffentlichte Ergebnisse nachvollzogen werden können.
9. Diese Methode ist ebenso imstande, instabiles Grenzflächenwachstum mit der korrekten Symmetrie zu beschreiben.

Ehrenwörtliche Erklärung

Ich erkläre hiermit ehrenwörtlich, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig, ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel und Literatur angefertigt habe. Die aus anderen Quellen direkt oder indirekt übernommenen Daten und Konzepte sind unter Angabe der Quelle gekennzeichnet.

Bei der Auswahl und Auswertung folgenden Materials haben mir die nachstehend aufgeführten Personen in der jeweils beschriebenen Weise entgeltlich/unentgeltlich geholfen:

- Markus Pitzing: Hilfe bei der Implementierung des dreidimensionalen ZA-Modells sowie des Modells mit Gitterrotation im Rahmen seiner Diplomarbeit bzw. HiWi-Tätigkeit.

Weitere Personen waren an der inhaltlich-materiellen Erstellung der vorliegenden Arbeit nicht beteiligt. Insbesondere habe ich hierfür nicht die entgeltliche Hilfe von Vermittlungs- bzw. Beratungsdiensten (Promotionsberater oder andere Personen) in Anspruch genommen. Niemand hat von mir unmittelbar oder mittelbar geldwerte Leistungen für Arbeiten erhalten, die im Zusammenhang mit dem Inhalt der vorgelegten Dissertation stehen.

Die Arbeit wurde bisher weder im In- noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form einer anderen Prüfungsbehörde vorgelegt.

Die geltende Promotionsordnung der Physikalisch-Astronomischen Fakultät ist mir bekannt.

Ich versichere ehrenwörtlich, dass ich nach bestem Wissen die reine Wahrheit gesagt und nichts verschwiegen habe.

Jena, den

Lebenslauf und Wissenschaftlicher Werdegang

Klemens Reuther

geboren am 28.08.1983 in Dresden

Ausbildung

1990 - 1992	57. Polytechnische Oberschule Dresden
1992 - 1996	Kreuzgymnasium Dresden
1996 - 2002	Martin-Andersen-Nexø-Gymnasium Dresden
2002	Abitur, Durchschnittsnote 1,5
2002 - 2007	Studium der Physik an der TU Dresden, Spezialisierung in Strukturphysik
2007	Abschluss als Diplom-Physiker, Note "sehr gut"; Thema der Diplomarbeit: "Verformungsmechanismen in Nickel bei tiefen Temperaturen"
seit 2008	Promotion an der FSU Jena

Beruflicher Werdegang, bisherige Anstellungen

2002-2003	Von Ardenne Anlagentechnik GmbH: Studentische Hilfskraft für Oberflächenmessungen
2005 - 2006	TU Dresden: Praktikumsbetreuung
2007	TU Dresden: Studentische Hilfskraft zur Erstellung eines Vorlesungsmanuskriptes "Nichtlineare Optik"
2007 - 2008	Wissenschaftlicher Mitarbeiter an der TU Dresden, Institut für Strukturphysik, im DFG-Projekt "Zusammenhang von Textur und Materialschädigung bei zyklischer plastischer Verformung"
seit 2008	Wissenschaftlicher Mitarbeiter an der FSU Jena im Rahmen der Promotion

Jena, den